UNIVERSITÉ DE MONTRÉAL

CENTRE DE RECHERCHE SUR LES TRANSPORTS

CASE POSTALE 6128, SUCCURSALE A, MONTRÉAL, QUÉBEC, H3C 3J7

CALCUL DES DÉRIVÉES (PARTIELLES) DES FONCTIONS DE COÛT DANS LE PROGICIEL STAN

par

Jacques Guélat

Cette recherche a été subventionnée par des octrois du C.R.D.I. et du C.R.S.N.G.

Cette étude a été publiée grâce à une subvention du fonds F.C.A.R. pour l'aide et le soutien à la recherche.

Université de Montréal

Centre de recherche sur les transports - Publication #535

Octobre 1985 - Révisé en juillet 1987

Dépôt légal - 3e trimestre 1987

RÉSUMÉ

Une procédure d'estimation de la dérivée d'une fonction f au point x_0 est développée dans le contexte des fonctions de coût utilisées dans le progiciel STAN. Sa simplicité, sa précision relativement bonne et son niveau de généralité élevé la rendent intéressante pour une utilisation dans d'autres contextes.

Mots-clés : dérivée numérique d'une fonction, polynômes de Gram, moindres carrés.

Introduction

Dans le contexte du développement du progiciel STAN, outil de planification stratégique du transport des marchandises (cf. [1]), nous avons mis au point une procédure de dérivation de fonction qui se révèle à la fois simple, efficace et relativement précise. De plus, elle n'est pas liée directement aux spécificités des fonctions utilisées dans STAN et possède donc un niveau de généralité suffisant pour être utilisée dans d'autres contextes. La complexité des fonctions rencontrées dans le modèle utilisé dans STAN (cf. [3]) a toutefois guidé notre approche de résolution. D'autre part, comme il était exclu qu'on oblige l'utilisateur du logiciel à fournir les formes analytiques des dérivées (partielles) des fonctions de coût, nous avons développé cette procédure avec l'hypothèse implicite que seul l'accès à la forme analytique des fonctions elles-mêmes était permis.

Cette note technique est organisée de la façon suivante. Nous donnons tout d'abord la forme des polynômes d'approximation utilisés. Ensuite, la calibration des paramètres est effectuée à l'aide de quelques fonctions test. Le code FORTRAN de la procédure résultante est ensuite fourni. Finalement, des résultats de l'application de cette procédure aux fonctions utilisées dans STAN sont donnés.

1. Polynômes de Gram

Parmi la multitude des méthodes existantes pour calculer la dérivée d'une fonction f au point x_0, nous avons choisi une approximation polynomiale basée sur la méthode des moindres carrés, cette approche s'étant révélée supérieure en général à une formule d'interpolation (cf. Kellison [5], pp. 150-151). Dans le contexte des moindres carrés, l'utilisation de systèmes de polynômes orthogonaux est recommandée (cf. Hildebrand [4], p. 348). Parmi ces systèmes figurent les polynômes de Gram dont la forme est la suivante :

$$P_{m,n}(x) = \sum_{k=0}^{m} \frac{(-1)^{k+m}(m+k)!(n+x)!(2n-k)!}{(k!)^2(m-k)!(n+x-k)!(2n)!}$$

où m est le degré de P et N=2n+1 est le nombre de points d'interpolation.

2. Observations équidistantes

L'approximation par des polynômes de Gram s'applique au cas où les abcisses d'interpolation sont équidistantes. On suppose donc que les données suivantes sont disponibles :

$$(x_j, y_j) \quad j = -n, -n+1, \ldots, n$$

avec : pas = $h = x_{j+1} - x_j$ (indépendant de j!)

$$y_j = f(x_j) .$$

L'approximation des moindres carrés s'écrit alors :

$$Q_{m,n}(i) = \sum_{k=0}^{m} \left[\frac{\sum_{j=-n}^{n} y_j P_{k,n}(j)}{\sum_{j=-n}^{n} [P_{k,n}(j)]^2} \right] P_{k,n}(i) .$$

L'estimation de la dérivée $f'(x_0)$ est alors donnée par :

$$\frac{1}{h} Q'_{m,n}(0) = \frac{1}{h} \sum_{i=-n}^{n} \left[\sum_{k=0}^{m} \frac{P_{k,n}(i)\, P'_{k,n}(0)}{\sum_{j=-n}^{n} [P_{k,n}(j)]^2} \right] y_i . \qquad (1)$$

Ces formules, ainsi que le code FORTRAN réalisant les calculs, proviennent de Casaletto et Rice [2].

3. Calibration de m et n

La situation est la suivante :

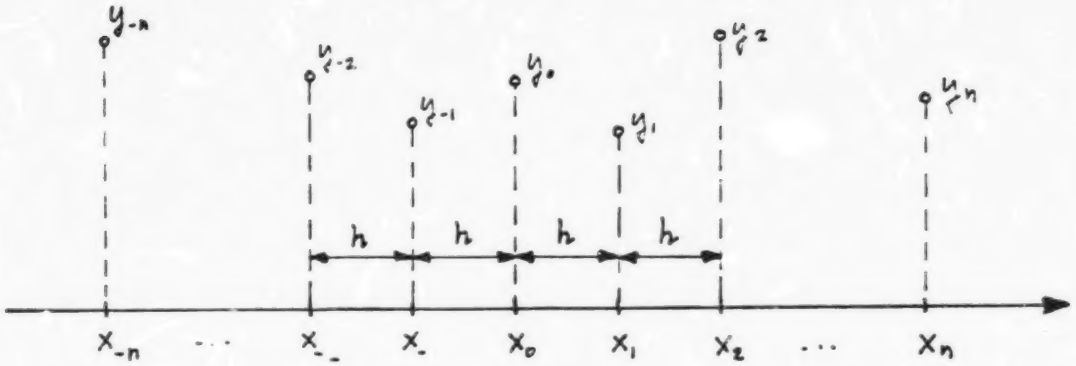

Figure 1 : Observations équidistantes

N = 2n+1 : nombre de points d'interpolation;

m : degré du polynôme d'approximation.

Nous avons testé différentes valeurs de m et n sur les fonctions suivantes :

1) EXP = exp(x)

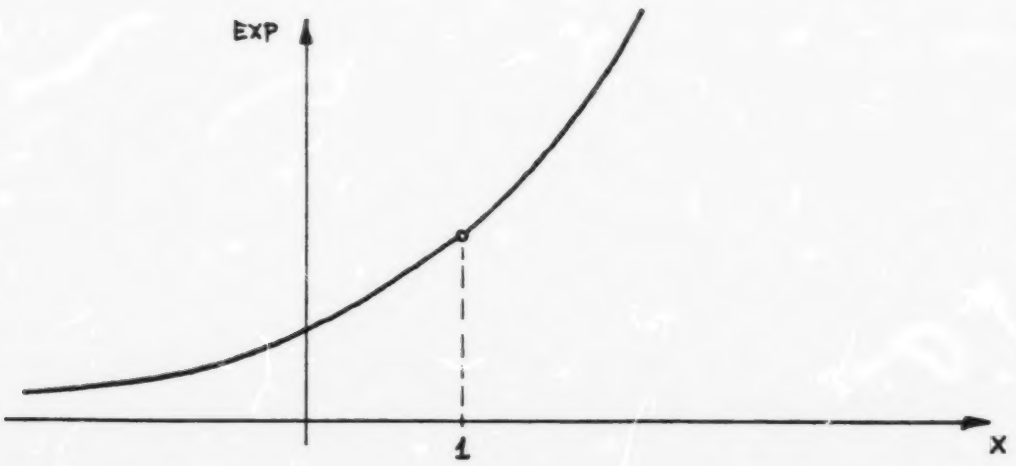

Figure 2 : Fonction test no 1, exponentielle

Les tableaux 1-6 fournissent les résultats pour la dérivée en x=1 (la dérivée seconde est aussi donnée) pour différents choix du pas h (appelé delta x dans les tableaux). Dans chaque tableau, on donne les valeurs estimées de la fonction, de sa dérivée première et seconde, ainsi que l'erreur relative en % sur leur valeur réelle. Les différentes valeurs de N sont 3,5,7 et 11. Pour chacune de ces valeurs, nous avons fait varier le degré m en respectant les contraintes $1 \leq m \leq \min(5,N-1)$ (l'algorithme de Casaletto et Rice ne permettant pas d'approximation de degré supérieur à 5). Dans ces tableaux, on trouve aussi une colonne indiquant le temps en secondes CPU (SUN/3-68020) mis pour exécuter mille estimations. Tous les calculs sont effectués en simple précision.

2) SIN = sin(x)

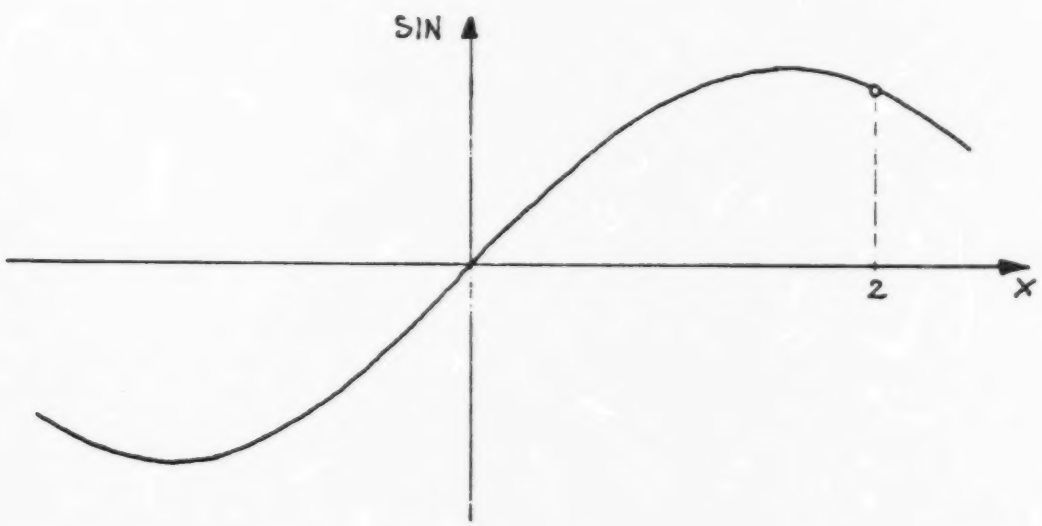

Figure 3 : Fonction test no 2, sinus

Les tableaux 7-11 fournissent les résultats pour la dérivée en x=2.

Tableau 1 : EXP, pas h=1

Points entrés:

j	x_j	y_j
-5	-4.00000	0.01832
-4	-3.00000	0.04979
-3	-2.00000	0.13534
-2	-1.00000	0.36788
-1	0.00000	1.00000
0	1.00000	2.71828
1	2.00000	7.38906
2	3.00000	20.08554
3	4.00000	54.59815
4	5.00000	148.41316
5	6.00000	403.42880

Valeur exacte de la fonction : 2.7182817
Valeur exacte de la dérivée : 2.7182817
Valeur exacte de la 2e dérivée : 2.7182817

Nb pts	Deg	Valeur estimee de la fonction	Erreur %	CPU 1000	Valeur estimee de la derivee	Erreur %	CPU 1000	Valeur estimee de la 2e deriv.	Erreur %	CPU 1000
3	1	3.7024460	36.2	0.4	3.1945279	17.5	0.6	0.0000000	100.0	0.1
3	2	2.7182817	0.0	0.7	3.1945279	17.5	0.6	2.9524927	8.6	0.9
5	1	6.3121510	132.2	0.5	4.5824370	68.6	0.8	0.0000000	100.0	0.1
5	2	2.4434059	10.1	1.1	4.5824370	68.6	0.8	3.8687446	42.3	1.2
5	3	2.4434059	10.1	1.1	2.6162326	3.8	1.3	3.8687446	42.3	1.2
5	4	2.7182820	0.0	1.2	2.6162326	3.8	1.2	2.6852524	1.2	1.6
7	1	12.3277493	353.5	0.6	7.4718862	174.9	0.9	0.0000000	100.0	0.1
7	2	1.0121710	62.8	1.4	7.4718862	174.9	0.9	5.6577883	108.1	1.5
7	3	1.0121710	62.8	1.4	1.9582002	28.0	1.7	5.6577883	108.1	1.4
7	4	2.7936754	2.8	2.0	1.9582002	28.0	1.7	2.3422105	13.8	2.3
7	5	2.7936754	2.8	2.0	2.7418573	0.9	3.1	2.3422105	13.8	2.3
11	1	58.0185700	*****	0.7	25.6338062	843.0	1.3	0.0000000	100.0	0.1
11	2	-19.6311493	822.2	1.8	25.6338062	843.0	1.2	15.5299454	471.3	1.9
11	3	-19.6311493	822.2	1.8	-7.1136270	361.7	2.2	15.5299454	471.3	1.9
11	4	6.1922770	127.8	2.5	-7.1136270	361.7	2.3	-2.4029891	188.4	2.9
11	5	6.1922770	127.8	2.6	4.1926122	54.2	4.2	-2.4029891	188.4	2.9

Tableau 2 : EXP, pas h=0.1

Points entrés:

j	x_j	y_j
-5	0.50000	1.64872
-4	0.60000	1.82212
-3	0.70000	2.01375
-2	0.80000	2.22554
-1	0.90000	2.45960
0	1.00000	2.71828
1	1.10000	3.00417
2	1.20000	3.32012
3	1.30000	3.66930
4	1.40000	4.05520
5	1.50000	4.48169

Valeur exacte de la fonction : 2.7182817
Valeur exacte de la dérivée : 2.7182817
Valeur exacte de la 2e dérivée : 2.7182817

Nb pts	Deg	Valeur estimee de la fonction	Erreur %	CPU 1000	Valeur estimee de la derivee	Erreur %	CPU 1000	Valeur estimee de la 2e deriv.	Erreur %	CPU 1000
3	1	2.7273502	0.3	0.5	2.7228153	0.2	0.6	0.0000000	100.0	0.1
3	2	2.7182817	0.0	0.7	2.7228153	0.2	0.6	2.7205403	0.1	0.9
5	1	2.7455418	1.0	0.5	2.7337153	0.6	0.8	0.0000000	100.0	0.1
5	2	2.7182586	0.0	1.1	2.7337153	0.6	0.8	2.7283392	0.4	1.2
5	3	2.7182586	0.0	1.1	2.7182734	0.0	1.3	2.7283392	0.4	1.2
5	4	2.7182820	0.0	1.2	2.7182734	0.0	1.3	2.7182670	0.0	1.7
7	1	2.7729652	2.0	0.6	2.7501235	1.2	0.9	0.0000000	100.0	0.1
7	2	2.7181649	0.0	1.4	2.7501235	1.2	0.9	2.7400265	0.8	1.4
7	3	2.7181649	0.0	1.4	2.7182260	0.0	1.7	2.7400265	0.8	1.4
7	4	2.7182817	0.0	2.0	2.7182260	0.0	1.7	2.7182841	0.0	2.3
7	5	2.7182817	0.0	2.0	2.7182822	0.0	3.1	2.7182841	0.0	2.3
11	1	2.8562262	5.1	0.7	2.7997737	3.0	1.3	0.0000000	100.0	0.1
11	2	2.7174575	0.0	1.8	2.7997737	3.0	1.3	2.7753673	2.1	1.9
11	3	2.7174575	0.0	1.8	2.7178466	0.0	2.2	2.7753673	2.1	1.9
11	4	2.7182837	0.0	2.6	2.7178466	0.0	2.2	2.7180262	0.0	2.9
11	5	2.7182837	0.0	2.6	2.7182996	0.0	4.2	2.7180262	0.0	2.9

Tableau 3 : EXP, pas h=0.01

Points entrés:

j	x_j	y_j
-5	0.95000	2.58571
-4	0.96000	2.61170
-3	0.97000	2.63794
-2	0.98000	2.66446
-1	0.99000	2.69123
0	1.00000	2.71828
1	1.01000	2.74560
2	1.02000	2.77319
3	1.03000	2.80107
4	1.04000	2.82922
5	1.05000	2.85765

Valeur exacte de la fonction : 2.7182817
Valeur exacte de la dérivée : 2.7182817
Valeur exacte de la 2e dérivée : 2.7182817

Nb pts	Deg	Valeur estimee de la fonction	Erreur %	CPU 1000	Valeur estimee de la derivee	Erreur %	CPU 1000	Valeur estimee de la 2e deriv.	Erreur %	CPU 1000
3	1	2.7183723	0.0	0.5	2.7183175	0.0	0.6	0.0000000	100.0	0.1
3	2	2.7182817	0.0	0.7	2.7183175	0.0	0.6	2.7160647	0.1	0.9
5	1	2.7185538	0.0	0.5	2.7184322	0.0	0.8	0.0000000	100.0	0.1
5	2	2.7182817	0.0	1.1	2.7184322	0.0	0.8	2.7194555	0.0	1.2
5	3	2.7182817	0.0	1.1	2.7182698	0.0	1.3	2.7194555	0.0	1.2
5	4	2.7182820	0.0	1.2	2.7182698	0.0	1.3	2.7191327	0.0	1.7
7	1	2.7188258	0.0	0.7	2.7185960	0.0	1.0	0.0000000	100.0	0.1
7	2	2.7182820	0.0	1.4	2.7185960	0.0	0.9	2.7184865	0.0	1.4
7	3	2.7182820	0.0	1.4	2.7182760	0.0	1.7	2.7184865	0.0	1.4
7	4	2.7182817	0.0	2.0	2.7182760	0.0	1.7	2.7206590	0.1	2.3
7	5	2.7182817	0.0	2.0	2.7182686	0.0	3.1	2.7206590	0.1	2.3
11	1	2.7196412	0.1	0.7	2.7190874	0.0	1.3	0.0000000	100.0	0.1
11	2	2.7182817	0.0	1.8	2.7190874	0.0	1.3	2.7188704	0.0	1.9
11	3	2.7182817	0.0	1.8	2.7182779	0.0	2.3	2.7188704	0.0	1.9
11	4	2.7182820	0.0	2.6	2.7182779	0.0	2.3	2.7184455	0.0	2.9
11	5	2.7182820	0.0	2.6	2.7182920	0.0	4.3	2.7184455	0.0	2.9

Tableau 4 : EXP, pas h=0.001

Points entrés:

j	x_j	y_j
-5	0.99500	2.70472
-4	0.99600	2.70743
-3	0.99700	2.71014
-2	0.99800	2.71285
-1	0.99900	2.71556
0	1.00000	2.71828
1	1.00100	2.72100
2	1.00200	2.72372
3	1.00300	2.72645
4	1.00400	2.72918
5	1.00500	2.73191

Valeur exacte de la fonction : 2.7182817
Valeur exacte de la dérivée : 2.7182817
Valeur exacte de la 2e dérivée : 2.7182817

Nb pts	Deg	Valeur estimee de la fonction	Erreur %	CPU 1000	Valeur estimee de la derivee	Erreur %	CPU 1000	Valeur estimee de la 2e deriv.	Erreur %	CPU 1000
3	1	2.7182827	0.0	0.4	2.7183294	0.0	0.6	0.0000000	100.0	0.1
3	2	2.7182817	0.0	0.7	2.7183294	0.0	0.6	2.5431314	6.4	0.9
5	1	2.7182844	0.0	0.5	2.7182341	0.0	0.8	0.0000000	100.0	0.1
5	2	2.7182817	0.0	1.2	2.7182341	0.0	0.8	2.7126732	0.2	1.2
5	3	2.7182817	0.0	1.1	2.7183692	0.0	1.3	2.7126732	0.2	1.2
5	4	2.7182820	0.0	1.2	2.7183692	0.0	1.3	2.7126732	0.2	1.7
7	1	2.7182870	0.0	0.6	2.7182951	0.0	1.0	0.0000000	100.0	0.1
7	2	2.7182820	0.0	1.4	2.7182951	0.0	1.0	2.7772608	2.2	1.4
7	3	2.7182820	0.0	1.4	2.7182026	0.0	1.7	2.7772608	2.2	1.4
7	4	2.7182820	0.0	2.0	2.7182026	0.0	1.7	2.5052104	7.8	2.3
7	5	2.7182820	0.0	2.0	2.7184007	0.0	3.1	2.5052104	7.8	2.6
11	1	2.7182953	0.0	0.7	2.7182925	0.0	1.3	0.0000000	100.0	0.1
11	2	2.7182817	0.0	1.8	2.7182925	0.0	1.3	2.7189965	0.0	1.9
11	3	2.7182817	0.0	1.8	2.7182693	0.0	2.3	2.7189965	0.0	1.9
11	4	2.7182815	0.0	2.6	2.7182693	0.0	2.3	2.7661929	1.8	2.9
11	5	2.7182815	0.0	2.7	2.7182932	0.0	4.3	2.7661929	1.8	2.9

Tableau 5 : EXP, pas h=0.0001

Points entrés:

j	x_j	y_j
-5	0.99950	2.71692
-4	0.99960	2.71719
-3	0.99970	2.71747
-2	0.99980	2.71774
-1	0.99990	2.71801
0	1.00000	2.71828
1	1.00010	2.71855
2	1.00020	2.71883
3	1.00030	2.71910
4	1.00040	2.71937
5	1.00050	2.71964

Valeur exacte de la fonction : 2.7182817
Valeur exacte de la dérivée : 2.7182817
Valeur exacte de la 2e dérivée : 2.7182817

Nb pts	Deg	Valeur estimee de la fonction	Erreur %	CPU 1000	Valeur estimee de la derivee	Erreur %	CPU 1000	Valeur estimee de la 2e deriv.	Erreur %	CPU 1000
3	1	2.7182817	0.0	0.5	2.7191641	0.0	0.6	0.0000000	100.0	0.1
3	2	2.7182817	0.0	0.7	2.7191641	0.0	0.6	0.0000000	100.0	0.9
5	1	2.7182817	0.0	0.5	2.7182102	0.0	0.8	0.0000000	100.0	0.1
5	2	2.7182815	0.0	1.1	2.7182102	0.0	0.8	19.3762417	612.8	1.2
5	3	2.7182815	0.0	1.1	2.7195611	0.1	1.3	19.3762417	612.8	1.2
5	4	2.7182820	0.0	1.2	2.7195611	0.1	1.3	17.2233257	533.6	1.7
7	1	2.7182820	0.0	0.6	2.7183125	0.0	1.0	0.0000000	100.0	0.1
7	2	2.7182820	0.0	1.4	2.7183125	0.0	1.0	12.9174948	375.2	1.4
7	3	2.7182820	0.0	1.4	2.7183125	0.0	1.7	12.9174948	375.2	1.4
7	4	2.7182815	0.0	2.0	2.7183125	0.0	1.7	5.0104222	84.3	2.3
7	5	2.7182815	0.0	2.0	2.7197995	0.1	3.1	5.0104222	84.3	2.3
11	1	2.7182820	0.0	0.7	2.7181668	0.0	1.3	0.0000000	100.0	0.1
11	2	2.7182817	0.0	1.8	2.7181668	0.0	1.3	2.5292995	7.0	1.9
11	3	2.7182817	0.0	1.8	2.7182167	0.0	2.3	2.5292995	7.0	1.9
11	4	2.7182817	0.0	2.5	2.7182167	0.0	2.3	12.3333473	353.7	2.9
11	5	2.7182817	0.0	2.6	2.7186694	0.0	4.3	12.3333473	353.7	2.9

Tableau 6 : EXP, pas h=0.00001

Points entrés:

j	x_j	y_j
-5	0.99995	2.71815
-4	0.99996	2.71817
-3	0.99997	2.71820
-2	0.99998	2.71823
-1	0.99999	2.71825
0	1.00000	2.71828
1	1.00001	2.71831
2	1.00002	2.71834
3	1.00003	2.71836
4	1.00004	2.71839
5	1.00005	2.71842

Valeur exacte de la fonction : 2.7182817
Valeur exacte de la dérivée : 2.7182817
Valeur exacte de la 2e dérivée : 2.7182817

Nb pts	Deg	Valeur estimee de la fonction	Erreur %	CPU 1000	Valeur estimee de la derivee	Erreur %	CPU 1000	Valeur estimee de la 2e deriv.	Erreur %	CPU 1000
3	1	2.7182817	0.0	0.4	2.7179718	0.0	0.6	0.0000000	100.0	0.1
3	2	2.7182817	0.0	0.7	2.7179718	0.0	0.6	0.0000000	100.0	0.9
5	1	2.7182817	0.0	0.5	2.7227404	0.2	0.8	0.0000000	100.0	0.1
5	2	2.7182815	0.0	1.1	2.7227404	0.2	0.8	0.0000000	100.0	1.2
5	3	2.7182815	0.0	1.1	2.7159851	0.1	1.3	0.0000000	100.0	1.2
5	4	2.7182820	0.0	1.2	2.7159851	0.1	1.3	1722.3324000	*****	1.7
7	1	2.7182820	0.0	0.6	2.7196748	0.1	1.1	0.0000000	100.0	0.1
7	2	2.7182820	0.0	1.4	2.7196748	0.1	1.0	645.8746950	*****	1.4
7	3	2.7182820	0.0	1.4	2.7243109	0.2	1.7	645.8746950	*****	1.4
7	4	2.7182815	0.0	2.0	2.7243109	0.2	1.7	-1002.0844100	*****	2.3
7	5	2.7182815	0.0	2.0	2.7143958	0.1	3.1	-1002.0844100	*****	2.3
11	1	2.7182820	0.0	0.7	2.7192724	0.0	1.3	0.0000000	100.0	0.1
11	2	2.7182817	0.0	1.8	2.7192724	0.0	1.3	-126.4649810	*****	1.9
11	3	2.7182817	0.0	1.8	2.7216632	0.1	2.3	-126.4649810	*****	1.9
11	4	2.7182815	0.0	2.6	2.7216632	0.1	2.3	704.7626950	*****	2.9
11	5	2.7182815	0.0	2.6	2.7202220	0.1	4.3	704.7626950	*****	2.9

Tableau 7 : SIN, pas h=1

Points entrés:

j	x_j	y_j
-5	-3.00000	-0.14112
-4	-2.00000	-0.90930
-3	-1.00000	-0.84147
-2	0.00000	0.00000
-1	1.00000	0.84147
0	2.00000	0.90930
1	3.00000	0.14112
2	4.00000	-0.75680
3	5.00000	-0.95892
4	6.00000	-0.27942
5	7.00000	0.65699

Valeur exacte de la fonction : 0.9092974
Valeur exacte de la dérivée : -0.4161468
Valeur exacte de la 2e dérivée : -0.9092974

Nb pts	Deg	Valeur estimee de la fonction	Erreur %	CPU 1000	Valeur estimee de la derivee	Erreur %	CPU 1000	Valeur estimee de la 2e deriv.	Erreur %	CPU 1000
3	1	0.6306295	30.6	0.5	-0.3501755	15.9	0.6	0.0000000	100.0	0.1
3	2	0.9092974	0.0	0.7	-0.3501755	15.9	0.6	-0.8360038	8.1	0.9
5	1	0.2270172	75.0	0.5	-0.2213956	46.8	0.8	0.0000000	100.0	0.1
5	2	0.8434159	7.2	1.1	-0.2213956	46.8	0.8	-0.6163987	32.2	1.2
5	3	0.8434159	7.2	1.1	-0.4038338	3.0	1.2	-0.6163987	32.2	1.2
5	4	0.9092974	0.0	1.1	-0.4038338	3.0	1.3	-0.9000553	1.0	1.6
7	1	-0.0950442	110.5	0.6	-0.0916541	78.0	0.9	0.0000000	100.0	0.1
7	2	0.6471910	28.8	1.4	-0.0916541	78.0	0.9	-0.3711176	59.2	1.4
7	3	0.6471910	28.8	1.3	-0.3521514	15.4	1.7	-0.3711176	59.2	1.4
7	4	0.8940017	1.7	1.9	-0.3521514	15.4	1.7	-0.8304597	8.7	2.2
7	5	0.8940017	1.7	1.9	-0.4137004	0.6	3.1	-0.8304597	8.7	2.3
11	1	-0.1216505	113.4	0.7	0.0358522	108.6	1.2	0.0000000	100.0	0.1
11	2	0.0064306	99.3	1.8	0.0358522	108.6	1.2	-0.0256162	97.2	1.9
11	3	0.0064306	99.3	1.8	-0.1368895	67.1	2.2	-0.0256162	97.2	1.9
11	4	0.6604054	27.4	2.5	-0.1368895	67.1	2.2	-0.4797654	47.2	2.9
11	5	0.6604054	27.4	2.5	-0.3537153	15.0	4.2	-0.4797654	47.2	2.8

Tableau 8 : SIN, pas h=0.1

Points entrés:

j	x_j	y_j
-5	1.50000	0.99749
-4	1.60000	0.99957
-3	1.70000	0.99166
-2	1.80000	0.97385
-1	1.90000	0.94630
0	2.00000	0.90930
1	2.10000	0.86321
2	2.20000	0.80850
3	2.30000	0.74571
4	2.40000	0.67546
5	2.50000	0.59847

Valeur exacte de la fonction : 0.9092974
Valeur exacte de la dérivée : -0.4161468
Valeur exacte de la 2e dérivée : -0.9092974

Nb pts	Deg	Valeur estimee de la fonction	Erreur %	CPU 1000	Valeur estimee de la derivee	Erreur %	CPU 1000	Valeur estimee de la 2e deriv.	Erreur %	CPU 1000
3	1	0.9062690	0.3	0.5	-0.4154533	0.2	0.6	0.0000000	100.0	0.1
3	2	0.9092974	0.0	0.7	-0.4154533	0.2	0.6	-0.9085337	0.1	0.9
5	1	0.9002302	1.0	0.5	-0.4137931	0.6	0.8	0.0000000	100.0	0.1
5	2	0.9092896	0.0	1.2	-0.4137931	0.6	0.8	-0.9059458	0.4	1.2
5	3	0.9092896	0.0	1.1	-0.4161451	0.0	1.3	-0.9059458	0.4	1.2
5	4	0.9092974	0.0	1.2	-0.4161451	0.0	1.3	-0.9092947	0.0	1.6
7	1	0.8912173	2.0	0.6	-0.4113114	1.2	1.0	0.0000000	100.0	0.1
7	2	0.9092587	0.0	1.5	-0.4113114	1.2	0.9	-0.9020674	0.8	1.4
7	3	0.9092587	0.0	1.4	-0.4161380	0.0	1.7	-0.9020674	0.8	1.4
7	4	0.9092974	0.0	2.0	-0.4161380	0.0	1.7	-0.9092888	0.0	2.3
7	5	0.9092974	0.0	2.0	-0.4161464	0.0	3.1	-0.9092888	0.0	2.3
11	1	0.8645022	4.9	0.7	-0.4039299	2.9	1.3	0.0000000	100.0	0.1
11	2	0.9090276	0.0	1.8	-0.4039299	2.9	1.3	-0.8905056	2.1	1.9
11	3	0.9090276	0.0	1.8	-0.4160813	0.0	2.2	-0.8905056	2.1	1.9
11	4	0.9092969	0.0	2.6	-0.4160813	0.0	2.3	-0.9092125	0.0	2.9
11	5	0.9092969	0.0	2.6	-0.4161489	0.0	4.3	-0.9092125	0.0	2.9

Tableau 9 : SIN, pas h=0.01

Points entrés:

j	x_j	y_j
-5	1.95000	0.92896
-4	1.96000	0.92521
-3	1.97000	0.92137
-2	1.98000	0.91744
-1	1.99000	0.91341
0	2.00000	0.90930
1	2.01000	0.90509
2	2.02000	0.90079
3	2.03000	0.89641
4	2.04000	0.89193
5	2.05000	0.88736

Valeur exacte de la fonction : 0.9092974
Valeur exacte de la dérivée : -0.4161468
Valeur exacte de la 2e dérivée : -0.9092974

Nb pts	Deg	Valeur estimee de la fonction	Erreur %	CPU 1000	Valeur estimee de la derivee	Erreur %	CPU 1000	Valeur estimee de la 2e deriv.	Erreur %	CPU 1000
3	1	0.9092671	0.0	0.5	-0.4161358	0.0	0.6	0.0000000	100.0	0.1
3	2	0.9092974	0.0	0.7	-0.4161358	0.0	0.6	-0.9104412	0.1	0.9
5	1	0.9092065	0.0	0.5	-0.4161215	0.0	0.8	0.0000000	100.0	0.1
5	2	0.9092974	0.0	1.1	-0.4161215	0.0	0.8	-0.9092302	0.0	1.2
5	3	0.9092974	0.0	1.1	-0.4161418	0.0	1.3	-0.9092302	0.0	1.2
5	4	0.9092974	0.0	1.2	-0.4161418	0.0	1.3	-0.9110064	0.2	1.6
7	1	0.9091156	0.0	0.7	-0.4160968	0.0	1.0	0.0000000	100.0	0.1
7	2	0.9092974	0.0	1.4	-0.4160968	0.0	0.9	-0.9090686	0.0	1.4
7	3	0.9092974	0.0	1.4	-0.4161443	0.0	1.8	-0.9090686	0.0	1.4
7	4	0.9092974	0.0	2.0	-0.4161443	0.0	1.8	-0.9097673	0.1	2.3
7	5	0.9092974	0.0	2.0	-0.4161412	0.0	3.1	-0.9097673	0.1	2.3
11	1	0.9088429	0.1	0.7	-0.4160227	0.0	1.3	0.0000000	100.0	0.1
11	2	0.9092973	0.0	1.8	-0.4160227	0.0	1.3	-0.9090934	0.0	1.9
11	3	0.9092973	0.0	1.8	-0.4161451	0.0	2.3	-0.9090934	0.0	1.9
11	4	0.9092973	0.0	2.6	-0.4161451	0.0	2.3	-0.9091438	0.0	2.9
11	5	0.9092973	0.0	2.6	-0.4161468	0.0	4.3	-0.9091438	0.0	3.4

Tableau 10 : SIN, pas h=0.001

Points entrés:

j	x_j	y_j
-5	1.99500	0.91137
-4	1.99600	0.91095
-3	1.99700	0.91054
-2	1.99800	0.91013
-1	1.99900	0.90971
0	2.00000	0.90930
1	2.00100	0.90888
2	2.00200	0.90846
3	2.00300	0.90804
4	2.00400	0.90763
5	2.00500	0.90721

Valeur exacte de la fonction : 0.9092974
Valeur exacte de la dérivée : -0.4161468
Valeur exacte de la 2e dérivée : -0.9092974

Nb pts	Deg	Valeur estimee de la fonction	Erreur %	CPU 1000	Valeur estimee de la derivee	Erreur %	CPU 1000	Valeur estimee de la 2e deriv.	Erreur %	CPU 1000
3	1	0.9092970	0.0	0.5	-0.4161596	0.0	0.6	0.0000000	100.0	0.1
3	2	0.9092974	0.0	0.7	-0.4161596	0.0	0.6	-1.0172526	11.9	0.9
5	1	0.9092964	0.0	0.5	-0.4161477	0.0	0.8	0.0000000	100.0	0.1
5	2	0.9092974	0.0	1.1	-0.4161477	0.0	0.8	-0.9203713	1.2	1.2
5	3	0.9092974	0.0	1.1	-0.4161646	0.0	1.3	-0.9203713	1.2	1.3
5	4	0.9092974	0.0	1.2	-0.4161646	0.0	1.3	-1.0549284	16.0	1.7
7	1	0.9092955	0.0	0.6	-0.4161490	0.0	1.1	0.0000000	100.0	0.2
7	2	0.9092974	0.0	1.8	-0.4161490	0.0	1.0	-0.9203713	1.2	1.4
7	3	0.9092974	0.0	1.4	-0.4161490	0.0	1.7	-0.9203713	1.2	1.4
7	4	0.9092974	0.0	2.0	-0.4161490	0.0	1.7	-0.8893498	2.2	2.3
7	5	0.9092974	0.0	2.0	-0.4161676	0.0	3.1	-0.8893498	2.2	2.4
11	1	0.9092928	0.0	0.8	-0.4161477	0.0	1.3	0.0000000	100.0	0.1
11	2	0.9092974	0.0	1.8	-0.4161477	0.0	1.3	-0.9042245	0.6	1.9
11	3	0.9092974	0.0	1.8	-0.4161409	0.0	2.3	-0.9042245	0.6	1.9
11	4	0.9092975	0.0	2.6	-0.4161409	0.0	2.3	-0.8897627	2.1	2.9
11	5	0.9092975	0.0	2.6	-0.4161652	0.0	4.3	-0.8897627	2.1	2.9

Tableau 11 : SIN, pas h=0.0001

Points entrés:

j	x_j	y_j
-5	1.99950	0.90951
-4	1.99960	0.90946
-3	1.99970	0.90942
-2	1.99980	0.90938
-1	1.99990	0.90934
0	2.00000	0.90930
1	2.00010	0.90926
2	2.00020	0.90921
3	2.00030	0.90917
4	2.00040	0.90913
5	2.00050	0.90909

Valeur exacte de la fonction : 0.9092974
Valeur exacte de la dérivée : -0.4161468
Valeur exacte de la 2e dérivée : -0.9092974

Nb pts	Deg	Valeur estimee de la fonction	Erreur %	CPU 1000	Valeur estimee de la derivee	Erreur %	CPU 1000	Valeur estimee de la 2e deriv.	Erreur %	CPU 1000
3	1	0.9092975	0.0	0.4	-0.4157424	0.1	0.6	0.0000000	100.0	0.1
3	2	0.9092974	0.0	0.7	-0.4157424	0.1	0.6	0.0000000	100.0	0.9
5	1	0.9092973	0.0	0.5	-0.4163384	0.1	0.8	0.0000000	100.0	0.1
5	2	0.9092975	0.0	1.1	-0.4163384	0.1	0.8	-4.8440604	432.7	1.2
5	3	0.9092975	0.0	1.1	-0.4154940	0.2	1.3	-4.8440604	432.7	1.2
5	4	0.9092974	0.0	1.2	-0.4154940	0.2	1.3	19.3762398	*****	1.7
7	1	0.9092974	0.0	0.6	-0.4162107	0.0	1.0	0.0000000	100.0	0.1
7	2	0.9092975	0.0	1.4	-0.4162107	0.0	1.0	1.6146868	277.6	1.4
7	3	0.9092975	0.0	1.4	-0.4163266	0.0	1.8	1.6146868	277.6	1.4
7	4	0.9092975	0.0	2.0	-0.4163266	0.0	1.7	-11.2734499	*****	2.3
7	5	0.9092975	0.0	2.0	-0.4153351	0.2	3.1	-11.2734499	*****	2.3
11	1	0.9092974	0.0	0.7	-0.4161542	0.0	1.3	0.0000000	100.0	0.1
11	2	0.9092975	0.0	1.8	-0.4161542	0.0	1.3	-0.6323249	30.5	1.9
11	3	0.9092975	0.0	1.9	-0.4162758	0.0	2.3	-0.6323249	30.5	1.9
11	4	0.9092973	0.0	2.6	-0.4162758	0.0	2.3	-1.7619067	93.8	2.9
11	5	0.9092973	0.0	2.5	-0.4162418	0.0	4.3	-1.7619067	93.8	2.9

3) TG = tg(x)

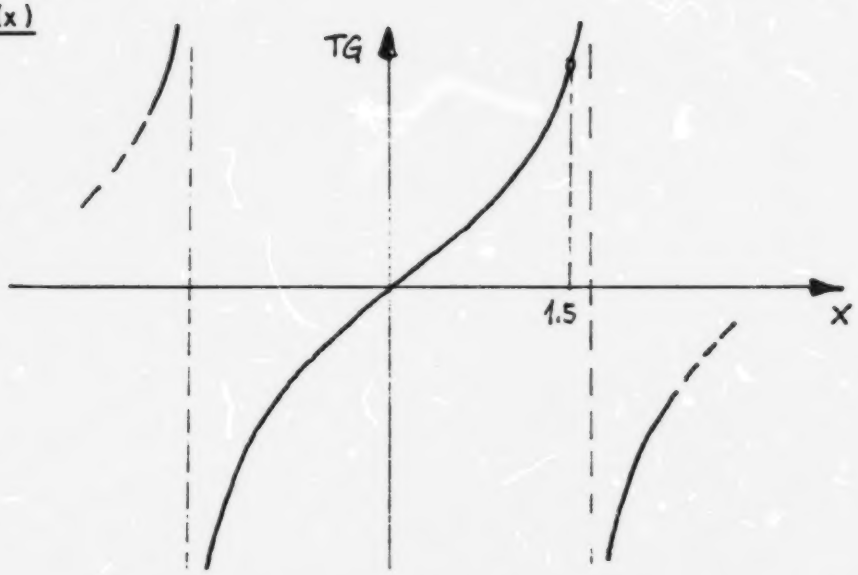

Figure 4 : Fonction test no 3 – tangente

Les tableaux 12-17 fournissent les résultats pour la dérivée en x = 1.5.

4) VD = volume-délai

$$VD = 2\left(1 + 5\left(\frac{x}{500}\right)^{3.8}\right)$$

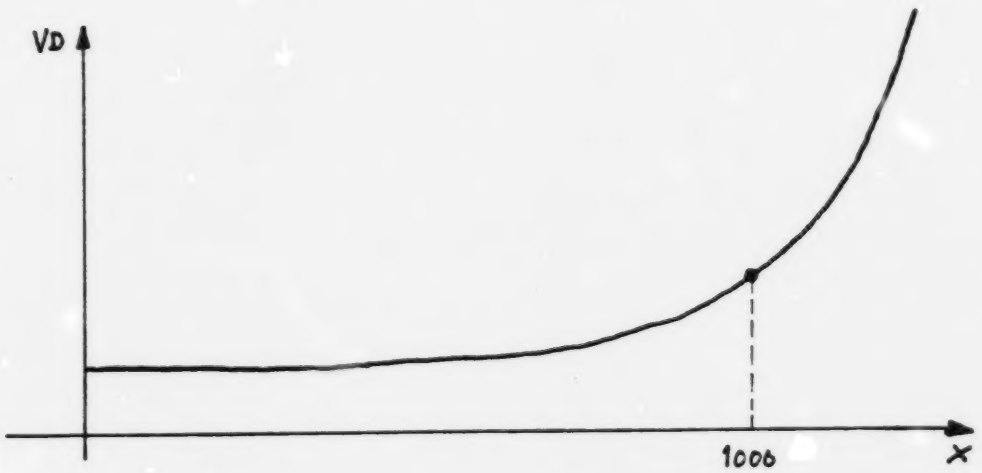

Figure 5 : Fonction test no 4, volume-délai

Tableau 12 : TG, pas h=1

Points entrés:

j	x_j	y_j
-5	-3.50000	-0.37459
-4	-2.50000	0.74702
-3	-1.50000	-14.10142
-2	-0.50000	-0.54630
-1	0.50000	0.54630
0	1.50000	14.10142
1	2.50000	-0.74702
2	3.50000	0.37459
3	4.50000	4.63733
4	5.50000	-0.99558
5	6.50000	0.22028

Valeur exacte de la fonction : 14.1014204
Valeur exacte de la dérivée : 199.8500210
Valeur exacte de la 2e dérivée : 5636.3378900

Nb pts	Deg	Valeur estimee de la fonction	Erreur %	CPU 1000	Valeur estimee de la derivee	Erreur %	CPU 1000	Valeur estimee de la 2e deriv.	Erreur %	CPU 1000
3	1	4.6335669	67.1	0.5	-0.6466624	100.3	0.6	0.0000000	100.0	0.1
3	2	14.1014204	0.0	0.7	-0.6466624	100.3	0.6	-28.4035606	100.5	0.9
5	1	2.7457967	80.5	0.5	0.0548451	100.0	0.8	0.0000000	100.0	0.1
5	2	6.7951617	51.8	1.2	0.0548451	100.0	0.8	-4.0493650	100.1	1.2
5	3	6.7951617	51.8	1.2	-0.9389571	100.5	1.2	-4.0493650	100.1	1.2
5	4	14.1014195	0.0	1.2	-0.9389571	100.5	1.2	-35.5068665	100.6	1.7
7	1	0.6092705	95.7	0.6	2.0273108	99.0	0.9	0.0000000	100.0	0.2
7	2	5.5199356	60.9	1.4	2.0273108	99.0	0.9	-2.4553323	100.0	1.4
7	3	5.5199356	60.9	1.4	-1.6887535	100.8	1.7	-2.4553323	100.0	1.4
7	4	7.7491913	45.0	2.0	-1.6887535	100.8	1.7	-6.6042256	100.1	2.3
7	5	7.7491913	45.0	2.0	-0.7958142	100.4	3.1	-6.6042256	100.1	2.3
11	1	0.3510930	97.5	0.7	0.4797145	99.8	1.2	0.0000000	100.0	0.1
11	2	1.8956076	86.6	1.9	0.4797145	99.8	1.2	-0.3089029	100.0	1.9
11	3	1.8956076	86.6	1.8	1.8179126	99.1	2.2	-0.3089029	100.0	1.9
11	4	4.8605185	65.5	2.6	1.8179126	99.1	2.2	-2.3678684	100.0	2.9
11	5	4.8605185	65.5	2.6	1.5738267	99.2	4.2	-2.3678684	100.0	2.9

Tableau 13 : TG, pas h=0.1

Points entrés:

j	x_j	y_j
-5	1.00000	1.55741
-4	1.10000	1.96476
-3	1.20000	2.57215
-2	1.30000	3.60210
-1	1.40000	5.79788
0	1.50000	14.10142
1	1.60000	-34.23251
2	1.70000	-7.69660
3	1.80000	-4.28626
4	1.90000	-2.92710
5	2.00000	-2.18504

Valeur exacte de la fonction : 14.1014204
Valeur exacte de la dérivée : 199.8500210
Valeur exacte de la 2e dérivée : 5636.3378900

Nb pts	Deg	Valeur estimee de la fonction	Erreur %	CPU 1000	Valeur estimee de la derivee	Erreur %	CPU 1000	Valeur estimee de la 2e deriv.	Erreur %	CPU 1000
3	1	-4.7777343	133.9	0.4	-200.1519320	200.2	0.6	0.0000000	100.0	0.1
3	2	14.1014204	0.0	0.7	-200.1519320	200.2	0.6	-5663.7461000	200.5	0.9
5	1	-3.6855397	126.1	0.5	-62.6277886	131.3	0.8	0.0000000	100.0	0.1
5	2	-2.5487962	118.1	1.1	-62.6277886	131.3	0.8	-113.6744310	102.0	1.2
5	3	-2.5487962	118.1	1.2	-257.4536740	228.8	1.2	-113.6744310	102.0	1.2
5	4	14.1014195	0.0	1.2	-257.4536740	228.8	1.3	-7282.5170900	229.2	1.6
7	1	-2.8774014	120.4	0.6	-29.7153664	114.9	0.9	0.0000000	100.0	0.1
7	2	-3.8453846	127.3	1.5	-29.7153664	114.9	0.9	48.3991432	99.1	1.4
7	3	-3.8453846	127.3	1.4	-116.1861110	158.1	1.7	48.3991432	99.1	1.4
7	4	-0.7404599	105.3	2.0	-116.1861110	158.1	1.7	-529.4617310	109.4	2.3
7	5	-0.7404599	105.3	2.0	-284.4229130	242.3	3.1	-529.4617310	109.4	2.3
11	1	-1.9756163	114.0	0.7	-11.0438814	105.5	1.2	0.0000000	100.0	0.1
11	2	-3.4440312	124.4	1.9	-11.0438814	105.5	1.2	29.3682938	99.5	1.9
11	3	-3.4440312	124.4	1.8	-41.7567864	120.9	2.2	29.3682938	99.5	1.9
11	4	-3.7113581	126.3	2.6	-41.7567864	120.9	2.2	47.9326668	99.1	2.9
11	5	-3.7113581	126.3	2.6	-96.8588943	148.5	4.2	47.9326668	99.1	2.9

Tableau 14 : TG, pas h=0.01

Points entrés:

j	x_j	y_j
-5	1.45000	8.23810
-4	1.46000	8.98861
-3	1.47000	9.88738
-2	1.48000	10.98338
-1	1.49000	12.34986
0	1.50000	14.10142
1	1.51000	16.42809
2	1.52000	19.66952
3	1.53000	24.49839
4	1.54000	32.46110
5	1.55000	48.07837

Valeur exacte de la fonction : 14.1014204
Valeur exacte de la dérivée : 199.8500210
Valeur exacte de la 2e dérivée : 5636.3378900

Nb pts	Deg	Valeur estimee de la fonction	Erreur %	CPU 1000	Valeur estimee de la derivee	Erreur %	CPU 1000	Valeur estimee de la 2e deriv.	Erreur %	CPU 1000
3	1	14.2931223	1.4	0.5	203.9115450	2.0	0.6	0.0000000	100.0	0.1
3	2	14.1014204	0.0	0.7	203.9115450	2.0	0.6	5751.0581100	2.0	0.9
5	1	14.7064543	4.3	0.5	214.5050960	7.3	0.8	0.0000000	100.0	0.1
5	2	14.0885944	0.1	1.2	214.5050960	7.3	0.8	6178.6108400	9.6	1.2
5	3	14.0885944	0.1	1.1	199.4975590	0.2	1.2	6178.6108400	9.6	1.2
5	4	14.1014195	0.0	1.2	199.4975590	0.2	1.3	5626.3564500	0.2	1.6
7	1	15.4168625	9.3	0.6	233.1555630	16.7	0.9	0.0000000	100.0	0.1
7	2	14.0268946	0.5	1.4	233.1555630	16.7	0.9	6949.8388700	23.3	1.4
7	3	14.0268946	0.5	1.5	197.2485500	1.3	1.7	6949.8388700	23.3	1.4
7	4	14.1037817	0.0	2.0	197.2485500	1.3	1.7	5518.8754900	2.1	2.3
7	5	14.1037817	0.0	2.0	199.9269260	0.0	3.1	5518.8754900	2.1	2.3
11	1	18.6985645	32.6	0.7	325.7953490	63.0	1.3	0.0000000	100.0	0.1
11	2	13.1609640	6.7	1.8	325.7953490	63.0	1.2	11075.2070000	96.5	2.3
11	3	13.1609640	6.7	1.8	161.1921390	19.3	2.3	11075.2070000	96.5	1.9
11	4	14.2508917	1.1	2.5	161.1921390	19.3	2.2	3506.2419400	37.8	2.9
11	5	14.2508917	1.1	2.5	207.4321900	3.8	4.3	3506.2419400	37.8	3.0

Tableau 15 : TG, pas h=0.001

Points entrés:

j	x_j	y_j
-5	1.49500	13.16798
-4	1.49600	13.34471
-3	1.49700	13.52620
-2	1.49800	13.71269
-1	1.49900	13.90434
0	1.50000	14.10142
1	1.50100	14.30414
2	1.50200	14.51272
3	1.50300	14.72746
4	1.50400	14.94860
5	1.50500	15.17648

Valeur exacte de la fonction : 14.1014204
Valeur exacte de la dérivée : 199.8500210
Valeur exacte de la 2e dérivée : 5636.3378900

Nb pts	Deg	Valeur estimee de la fonction	Erreur %	CPU 1000	Valeur estimee de la derivee	Erreur %	CPU 1000	Valeur estimee de la 2e deriv.	Erreur %	CPU 1000
3	1	14.1032991	0.0	0.4	199.8992000	0.0	0.6	0.0000000	100.0	0.1
3	2	14.1014204	0.0	0.7	199.8992000	0.0	0.6	5637.6132800	0.0	0.9
5	1	14.1070604	0.0	0.5	199.9853970	0.1	0.8	0.0000000	100.0	0.1
5	2	14.1014185	0.0	1.1	199.9853970	0.1	0.8	5640.8100600	0.1	1.2
5	3	14.1014185	0.0	1.1	199.8632810	0.0	1.3	5640.8100600	0.1	1.2
5	4	14.1014195	0.0	1.2	199.8632810	0.0	1.3	5634.9541000	0.0	1.6
7	1	14.1127090	0.1	0.6	200.1301270	0.1	0.9	0.0000000	100.0	0.1
7	2	14.1014137	0.0	1.4	200.1301270	0.1	1.0	5647.2690400	0.2	1.4
7	3	14.1014137	0.0	1.4	199.8506780	0.0	1.7	5647.2690400	0.2	1.4
7	4	14.1014204	0.0	2.0	199.8506780	0.0	1.7	5635.7216800	0.0	2.3
7	5	14.1014204	0.0	2.0	199.8656620	0.0	3.1	5635.7216800	0.0	2.3
11	1	14.1297035	0.2	0.7	200.5609590	0.4	1.3	0.0000000	100.0	0.1
11	2	14.1013784	0.0	1.8	200.5609590	0.4	1.3	5664.6181700	0.5	1.9
11	3	14.1013784	0.0	1.8	199.8485110	0.0	2.3	5664.6181700	0.5	1.9
11	4	14.1014204	0.0	2.5	199.8485110	0.0	2.3	5635.9858400	0.0	2.9
11	5	14.1014204	0.0	2.5	199.8558200	0.0	4.3	5635.9858400	0.0	2.9

Tableau 16 : TG, pas h=0.0001

Points entrés:

j	x_j	y_j
-5	1.49950	14.00220
-4	1.49960	14.02194
-3	1.49970	14.04171
-2	1.49980	14.06155
-1	1.49990	14.08146
0	1.50000	14.10142
1	1.50010	14.12144
2	1.50020	14.14151
3	1.50030	14.16164
4	1.50040	14.18180
5	1.50050	14.20205

Valeur exacte de la fonction : 14.1014204
Valeur exacte de la dérivée : 199.8500210
Valeur exacte de la 2e dérivée : 5636.3378900

Nb pts	Deg	Valeur estimee de la fonction	Erreur %	CPU 1000	Valeur estimee de la derivee	Erreur %	CPU 1000	Valeur estimee de la 2e deriv.	Erreur %	CPU 1000
3	1	14.1014395	0.0	0.4	199.8806150	0.0	0.6	0.0000000	100.0	0.1
3	2	14.1014204	0.0	0.7	199.8806150	0.0	0.7	5696.6147500	1.1	0.9
5	1	14.1014767	0.0	0.5	199.8844150	0.0	0.8	0.0000000	100.0	0.1
5	2	14.1014204	0.0	1.1	199.8844150	0.0	0.8	5580.3574200	1.0	1.2
5	3	14.1014204	0.0	1.2	199.8790130	0.0	1.3	5580.3574200	1.0	1.2
5	4	14.1014195	0.0	1.2	199.8790130	0.0	1.3	5339.2304700	5.3	1.7
7	1	14.1015329	0.0	0.6	199.8860630	0.0	1.0	0.0000000	100.0	0.1
7	2	14.1014195	0.0	1.4	199.8860630	0.0	1.0	5632.0278300	0.1	1.4
7	3	14.1014195	0.0	1.4	199.8823400	0.0	1.7	5632.0278300	0.1	1.4
7	4	14.1014204	0.0	2.0	199.8823400	0.0	1.7	5531.5063500	1.9	2.3
7	5	14.1014204	0.0	2.0	199.8783720	0.0	3.1	5531.5063500	1.9	2.3
11	1	14.1017008	0.0	0.7	199.8513790	0.0	1.3	0.0000000	100.0	0.1
11	2	14.1014195	0.0	1.8	199.8513790	0.0	1.3	5635.2793000	0.0	1.9
11	3	14.1014195	0.0	1.8	199.8840940	0.0	2.3	5635.2793000	0.0	1.9
11	4	14.1014214	0.0	2.5	199.8840940	0.0	2.3	5624.0063500	0.2	2.9
11	5	14.1014214	0.0	2.6	199.9275670	0.0	4.3	5624.0063500	0.2	2.9

Tableau 17 : TG, pas h=0.00001

Points entrés:

j	x_j	y_j
-5	1.49995	14.09144
-4	1.49996	14.09342
-3	1.49997	14.09542
-2	1.49998	14.09742
-1	1.49999	14.09942
0	1.50000	14.10142
1	1.50001	14.10342
2	1.50002	14.10542
3	1.50003	14.10743
4	1.50004	14.10943
5	1.50005	14.11141

Valeur exacte de la fonction : 14.1014204
Valeur exacte de la dérivée : 199.8500210
Valeur exacte de la 2e dérivée : 5636.3378900

Nb pts	Deg	Valeur estimee de la fonction	Erreur %	CPU 1000	Valeur estimee de la derivee	Erreur %	CPU 1000	Valeur estimee de la 2e deriv.	Erreur %	CPU 1000
3	1	14.1014204	0.0	0.5	200.1285550	0.1	0.6	0.0000000	100.0	0.1
3	2	14.1014204	0.0	0.7	200.1285550	0.1	0.6	-20345.0527000	461.0	0.9
5	1	14.1014204	0.0	0.5	200.1094970	0.1	0.8	0.0000000	100.0	0.1
5	2	14.1014195	0.0	1.1	200.1094970	0.1	0.8	7750.4956100	37.5	1.2
5	3	14.1014195	0.0	1.2	200.1365200	0.1	1.3	7750.4956100	37.5	1.2
5	4	14.1014195	0.0	1.2	200.1365200	0.1	1.3	-25834.9863000	558.4	1.7
7	1	14.1014223	0.0	0.6	200.1217500	0.1	1.0	0.0000000	100.0	0.1
7	2	14.1014195	0.0	1.4	200.1217500	0.1	1.0	5166.9975600	8.3	1.4
7	3	14.1014195	0.0	1.4	200.1031950	0.1	1.7	5166.9975600	8.3	1.4
7	4	14.1014204	0.0	2.0	200.1031950	0.1	1.7	6012.5063500	6.7	2.3
7	5	14.1014204	0.0	2.0	200.1428530	0.1	3.1	6012.5063500	6.7	2.3
11	1	14.1014242	0.0	0.7	199.8979340	0.0	1.3	0.0000000	100.0	0.1
11	2	14.1014195	0.0	1.8	199.8979340	0.0	1.3	6070.3193400	7.7	1.9
11	3	14.1014195	0.0	1.8	200.4027710	0.3	2.3	6070.3193400	7.7	1.9
11	4	14.1014185	0.0	2.6	200.4027710	0.3	2.3	8457.1523400	50.0	2.9
11	5	14.1014185	0.0	2.5	199.9552150	0.1	4.3	8457.1523400	50.0	3.0

Tableau 18 : VD, pas h=100

Points entrés:

j	x_j	y_j
-5	500.00000	12.00000
-4	600.00000	21.99350
-3	700.00000	37.91588
-2	800.00000	61.65625
-1	900.00000	95.33305
0	1000.00000	141.28809
1	1100.00000	202.08116
2	1200.00000	280.48563
3	1300.00000	379.48410
4	1400.00000	502.26538
5	1500.00000	652.22064

Valeur exacte de la fonction : 141.2880860
Valeur exacte de la dérivée : 0.5292947
Valeur exacte de la 2e dérivée : 0.0014820

Nb pts	Deg	Valeur estimee de la fonction	Erreur %	CPU 1000	Valeur estimee de la derivee	Erreur %	CPU 1000	Valeur estimee de la 2e deriv.	Erreur %	CPU 1000
3	1	146.2341160	3.5	0.5	0.5337405	0.8	0.6	0.0000000	100.0	0.1
3	2	141.2880860	0.0	0.7	0.5337405	0.8	0.6	0.0014838	0.1	0.9
5	1	156.1688540	10.5	0.5	0.5444068	2.9	0.8	0.0000000	100.0	0.1
5	2	141.2697910	0.0	1.2	0.5444068	2.9	0.8	0.0014899	0.5	1.2
5	3	141.2697910	0.0	1.1	0.5292963	0.0	1.3	0.0014899	0.5	1.2
5	4	141.2880860	0.0	1.2	0.5292963	0.0	1.3	0.0014820	0.0	1.6
7	1	171.1777500	21.2	0.6	0.5603970	5.9	0.9	0.0000000	100.0	0.1
7	2	141.1965480	0.1	1.4	0.5603970	5.9	0.9	0.0014991	1.2	1.5
7	3	141.1965480	0.1	1.4	0.5293038	0.0	1.7	0.0014991	1.2	1.4
7	4	141.2881010	0.0	1.9	0.5293038	0.0	1.7	0.0014820	0.0	2.3
7	5	141.2881010	0.0	2.0	0.5292948	0.0	3.1	0.0014820	0.0	2.3
11	1	216.9748990	53.6	0.7	0.6083003	14.9	1.2	0.0000000	100.0	0.1
11	2	140.6461640	0.5	1.8	0.6083003	14.9	1.2	0.0015266	3.0	1.9
11	3	140.6461640	0.5	1.8	0.5293642	0.0	2.2	0.0015266	3.0	1.9
11	4	141.2884520	0.0	2.5	0.5293642	0.0	2.2	0.0014820	0.0	2.9
11	5	141.2884520	0.0	2.6	0.5292983	0.0	4.2	0.0014820	0.0	2.9

Tableau 19 : VD, pas h=10

Points entrés:

j	x_j	y_j
-5	950.00000	116.62086
-4	960.00000	121.27368
-3	970.00000	126.06424
-2	980.00000	130.99507
-1	990.00000	136.06880
0	1000.00000	141.28809
1	1010.00000	146.65558
2	1020.00000	152.17393
3	1030.00000	157.84590
4	1040.00000	163.67416
5	1050.00000	169.66145

Valeur exacte de la fonction : 141.2880860
Valeur exacte de la dérivée : 0.5292947
Valeur exacte de la 2e dérivée : 0.0014820

Nb pts	Deg	Valeur estimee de la fonction	Erreur %	CPU 1000	Valeur estimee de la derivee	Erreur %	CPU 1000	Valeur estimee de la 2e deriv.	Erreur %	CPU 1000
3	1	141.3374790	0.0	0.5	0.5293388	0.0	0.7	0.0000000	100.0	0.1
3	2	141.2880860	0.0	0.7	0.5293388	0.0	0.7	0.0014818	0.0	0.9
5	1	141.4362950	0.1	0.5	0.5294451	0.0	0.8	0.0000000	100.0	0.1
5	2	141.2880710	0.0	1.1	0.5294451	0.0	0.8	0.0014821	0.0	1.2
5	3	141.2880710	0.0	1.2	0.5292946	0.0	1.3	0.0014821	0.0	1.2
5	4	141.2880860	0.0	1.2	0.5292946	0.0	1.3	0.0014820	0.0	1.6
7	1	141.5845030	0.2	0.6	0.5296053	0.1	0.9	0.0000000	100.0	0.1
7	2	141.2880710	0.0	1.4	0.5296053	0.1	0.9	0.0014822	0.0	1.4
7	3	141.2880710	0.0	1.4	0.5292938	0.0	1.8	0.0014822	0.0	1.4
7	4	141.2880860	0.0	2.0	0.5292938	0.0	1.7	0.0014820	0.0	2.3
7	5	141.2880860	0.0	2.0	0.5292947	0.0	3.1	0.0014820	0.0	2.3
11	1	142.0292510	0.5	0.7	0.5300858	0.1	1.3	0.0000000	100.0	0.1
11	2	141.2880250	0.0	1.8	0.5300858	0.1	1.3	0.0014825	0.0	1.9
11	3	141.2880250	0.0	1.8	0.5292941	0.0	2.2	0.0014825	0.0	1.9
11	4	141.2880710	0.0	2.6	0.5292941	0.0	2.2	0.0014820	0.0	2.9
11	5	141.2880710	0.0	2.6	0.5292966	0.0	4.3	0.0014820	0.0	2.9

Tableau 20 : VD, pas h=1

Points entrés:

j	x_j	y_j
-5	995.00000	138.66008
-4	996.00000	139.18274
-3	997.00000	139.70685
-2	998.00000	140.23247
-1	999.00000	140.75954
0	1000.00000	141.28809
1	1001.00000	141.81815
2	1002.00000	142.34962
3	1003.00000	142.88266
4	1004.00000	143.41711
5	1005.00000	143.95314

Valeur exacte de la fonction : 141.2880860
Valeur exacte de la dérivée : 0.5292947
Valeur exacte de la 2e dérivée : 0.0014820

Nb pts	Deg	Valeur estimee de la fonction	Erreur %	CPU 1000	Valeur estimee de la derivee	Erreur %	CPU 1000	Valeur estimee de la 2e deriv.	Erreur %	CPU 1000
3	1	141.2885900	0.0	0.4	0.5293045	0.0	0.6	0.0000000	100.0	0.1
3	2	141.2880860	0.0	0.7	0.5293045	0.0	0.6	0.0015299	3.2	0.9
5	1	141.2895810	0.0	0.5	0.5292923	0.0	0.8	0.0000000	100.0	0.1
5	2	141.2881010	0.0	1.2	0.5292923	0.0	0.8	0.0014757	0.4	1.2
5	3	141.2881010	0.0	1.2	0.5293096	0.0	1.3	0.0014757	0.4	1.2
5	4	141.2880860	0.0	1.2	0.5293096	0.0	1.3	0.0015597	5.2	1.7
7	1	141.2910610	0.0	0.6	0.5292985	0.0	1.0	0.0000000	100.0	0.1
7	2	141.2881010	0.0	1.4	0.5292985	0.0	1.0	0.0014798	0.1	1.4
7	3	141.2881010	0.0	1.4	0.5292897	0.0	1.7	0.0014798	0.1	1.4
7	4	141.2881010	0.0	2.0	0.5292897	0.0	1.7	0.0014687	0.9	2.3
7	5	141.2881010	0.0	2.0	0.5293134	0.0	3.1	0.0014687	0.9	2.3
11	1	141.2955020	0.0	0.7	0.5293015	0.0	1.3	0.0000000	100.0	0.1
11	2	141.2881010	0.0	1.8	0.5293015	0.0	1.3	0.0014803	0.1	1.9
11	3	141.2881010	0.0	1.8	0.5292926	0.0	2.3	0.0014803	0.1	1.9
11	4	141.2881010	0.0	2.5	0.5292926	0.0	2.3	0.0014738	0.6	2.9
11	5	141.2881010	0.0	2.5	0.5293013	0.0	4.3	0.0014738	0.6	2.9

Tableau 21 : VD, pas h=0.1

Points entrés:

j	x_j	y_j
-5	999.50000	141.02361
-4	999.59998	141.07648
-3	999.70001	141.12936
-2	999.79999	141.18225
-1	999.90002	141.23518
0	1000.00000	141.28809
1	1000.09998	141.34103
2	1000.20001	141.39398
3	1000.29999	141.44690
4	1000.40002	141.49995
5	1000.50000	141.55290

Valeur exacte de la fonction : 141.2880860
Valeur exacte de la dérivée : 0.5292947
Valeur exacte de la 2e dérivée : 0.0014820

Nb pts	Deg	Valeur estimee de la fonction	Erreur %	CPU 1000	Valeur estimee de la derivee	Erreur %	CPU 1000	Valeur estimee de la 2e deriv.	Erreur %	CPU 1000
3	1	141.2881010	0.0	0.5	0.5292511	0.0	0.6	0.0000000	100.0	0.1
3	2	141.2880860	0.0	0.7	0.5292511	0.0	0.6	0.0065104	339.3	0.9
5	1	141.2881160	0.0	0.5	0.5293121	0.0	0.8	0.0000000	100.0	0.1
5	2	141.2881160	0.0	1.2	0.5293121	0.0	0.8	0.0006200	58.2	1.2
5	3	141.2881160	0.0	1.1	0.5292256	0.0	1.3	0.0006200	58.2	1.3
5	4	141.2880860	0.0	1.2	0.5292256	0.0	1.3	0.0063382	327.7	1.7
7	1	141.2881160	0.0	0.6	0.5292565	0.0	1.0	0.0000000	100.0	0.1
7	2	141.2881010	0.0	1.4	0.5292565	0.0	1.0	0.0006200	58.2	1.4
7	3	141.2881010	0.0	1.4	0.5293455	0.0	1.7	0.0006200	58.2	1.4
7	4	141.2881010	0.0	2.0	0.5293455	0.0	1.7	0.0003207	78.4	2.3
7	5	141.2881010	0.0	2.0	0.5292028	0.0	3.1	0.0003207	78.4	2.3
11	1	141.2881470	0.0	0.7	0.5293010	0.0	1.3	0.0000000	100.0	0.1
11	2	141.2880860	0.0	1.8	0.5293010	0.0	1.3	0.0012141	18.1	1.9
11	3	141.2880860	0.0	1.8	0.5292820	0.0	2.3	0.0012141	18.1	1.9
11	4	141.2881010	0.0	2.6	0.5292820	0.0	2.3	0.0014659	1.1	2.9
11	5	141.2881010	0.0	2.6	0.5292293	0.0	4.3	0.0014659	1.1	2.9

Les tableaux 18-21 fournissent les résultats pour la dérivée en $x = 1000$.

De ces différents tableaux, on tire les conclusions suivantes :

a) Quel que soit le choix de m et n, la précision des estimations dépend beaucoup de la grandeur du pas h choisi. Un pas trop grand produit des erreurs non négligeables pour toutes les estimations, alors qu'un pas trop petit affecte surtout les approximations de la dérivée seconde. Nous reviendrons sur le choix du pas h plus loin.

b) Les temps de calcul sont indépendants de la forme de la fonction f (on s'y attendait!). Par contre, ils semblent croître linéairement avec N (pour un même m) alors que la relation avec m est d'ordre supérieur à 1.

c) Le gain en précision obtenu à l'aide d'un N grand (N=11) ne se justifie pas. Par contre, l'instabilité rencontrée pour N=3 incite à rejeter cette possibilité.

Pour ce qui nous intéresse ici (le calcul de la dérivée), les deux meilleurs choix qui ressortent de l'analyse des résultats sont :

$N = 5 \quad (n = 2) \quad m = 3$

et : $N = 7 \quad (n = 3) \quad m = 5$.

Le premier cas nécessite quatre évaluations de la fonction, le second six (le point $y_0 = f(x_0)$ n'était pas utilisé dans la formule d'approximation).

Dans le cas où l'évaluation de la fonction est coûteuse, c'est évidemment le premier choix qui est préférable. Nous le conserverons donc pour la suite de l'analyse.

4. Formule d'approximation pour la dérivée

En utilisant les valeurs calibrées pour m et n au paragraphe précédent, on trouve à l'aide de (1) la formule suivante pour l'approximation de $f'(x_0)$:

$$\frac{1}{h} \sum_{i=-2}^{2} \left[\sum_{k=0}^{3} \frac{P_{k,2}(i)\, P'_{k,2}(0)}{\sum_{j=-2}^{2} [P_{k,2}(j)]^2} \right] y_i \ .$$

Or :

$$P_{0,2}(x) = 1$$

$$P_{1,2}(x) = \frac{x}{2}$$

$$P_{2,2}(x) = \frac{x^2-2}{2}$$

$$P_{3,2}(x) = \frac{5x^3 - 17x}{6} \ .$$

Ces formules sont tirées de Hildebrand [4], p. 351. En substituant dans la formule ci-dessus, on trouve :

$$f'(x_0) = \frac{1}{12h} (y_{-2} - y_2 - 8(y_{-1} - y_1)) \qquad (2)$$

5. Choix du pas h

Dans une procédure de calcul de la dérivée, le choix du pas h doit se faire automatiquement. Il nous faut donc trouver un moyen de faire un "bon" choix, car, comme on l'a remarqué précédemment, la précision de l'approximation dépend très fortement de ce choix.

Pour les quatre fonctions test utilisées auparavant, nous avons représenté l'erreur relative faite sur l'approximation de la dérivée en fonction de $\log_{10}(h)$, ceci pour différentes valeurs de x (cf. figures 6-15). Un intervalle "de confiance", c'est-à-dire où l'erreur relative est inférieure à 0.1%, est trouvé dans chaque cas.

Le choix initial du pas h ne peut se baser que sur les éléments connus à l'entrée de la procédure, à savoir x_0 et $y_0 = f(x_0)$. Les figures 16 et 17 donnent le choix de h optimal, ainsi que la région de confiance à 0.1%, en fonction de ces deux entités.

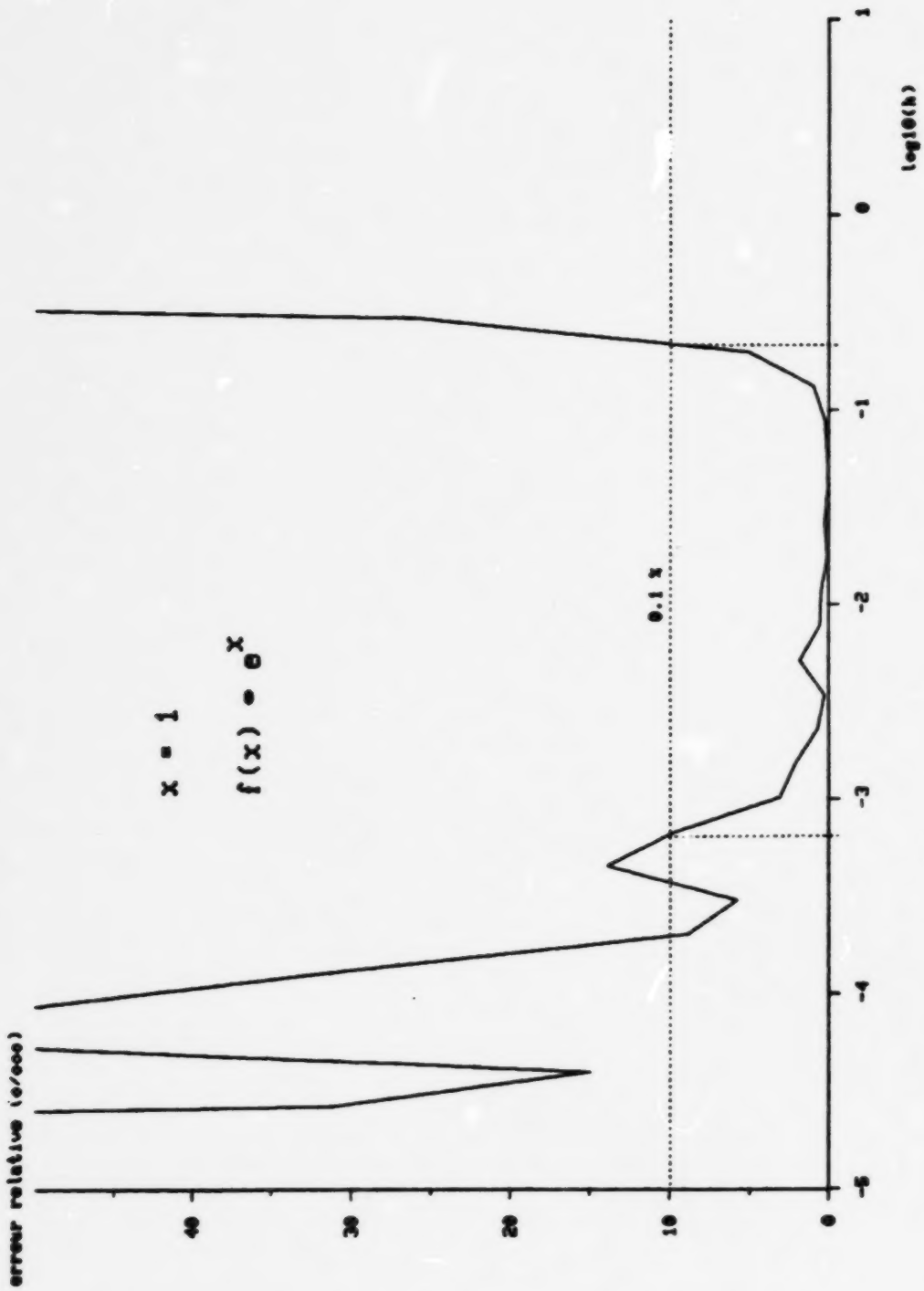

Figure 6 : EXP, x=1

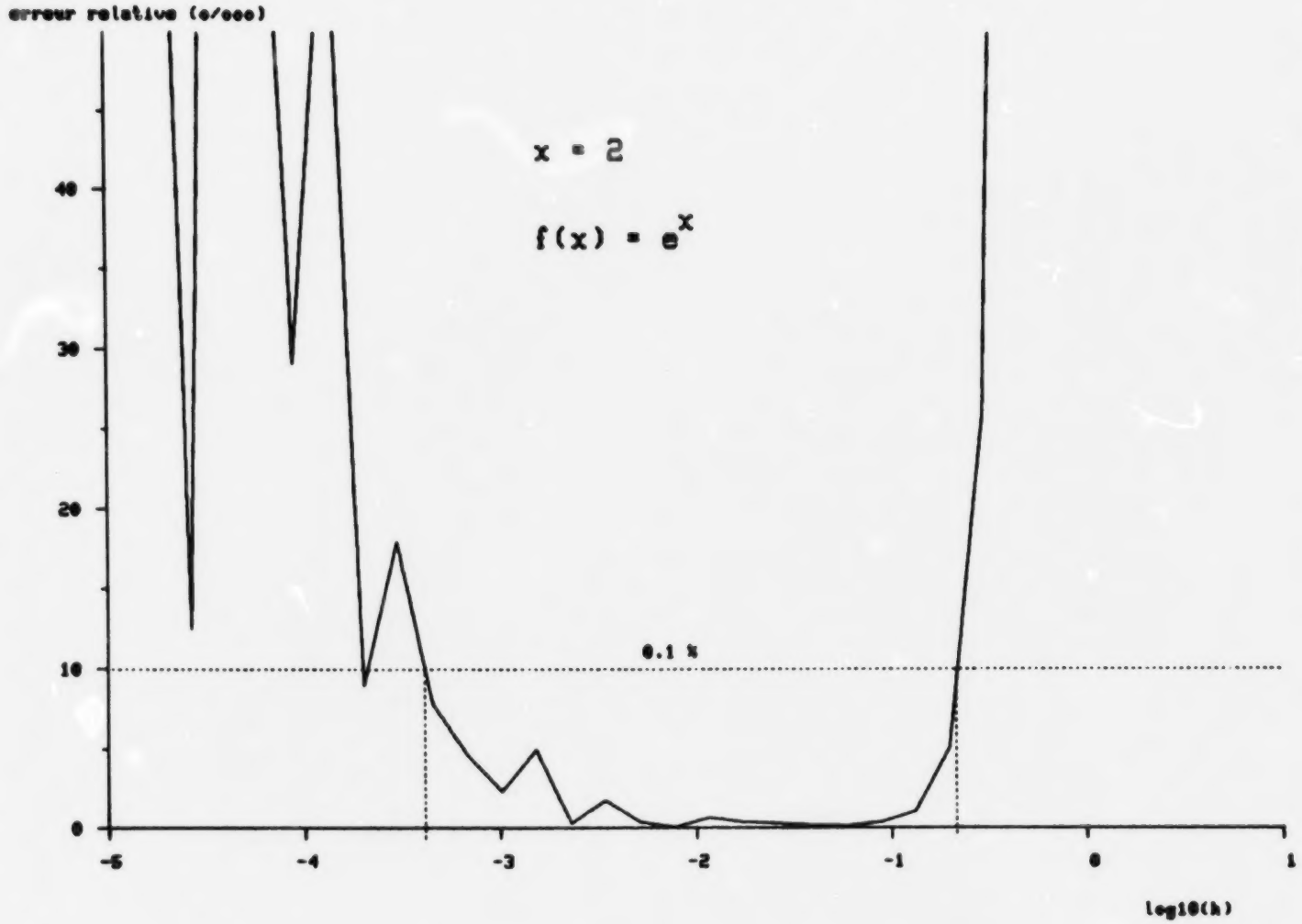

Figure 7 : EXP, x=2

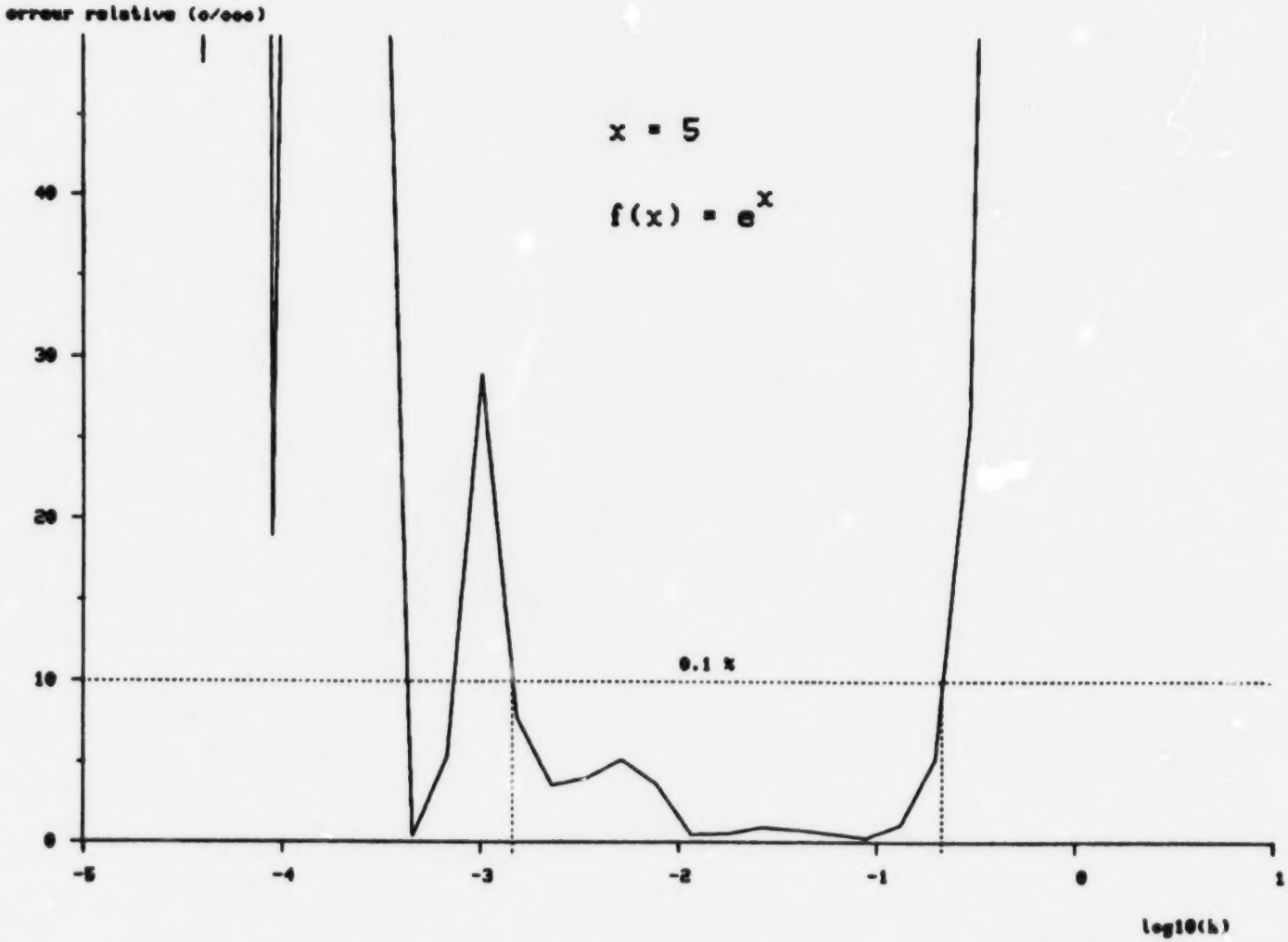

Figure 8 : EXP, x=5

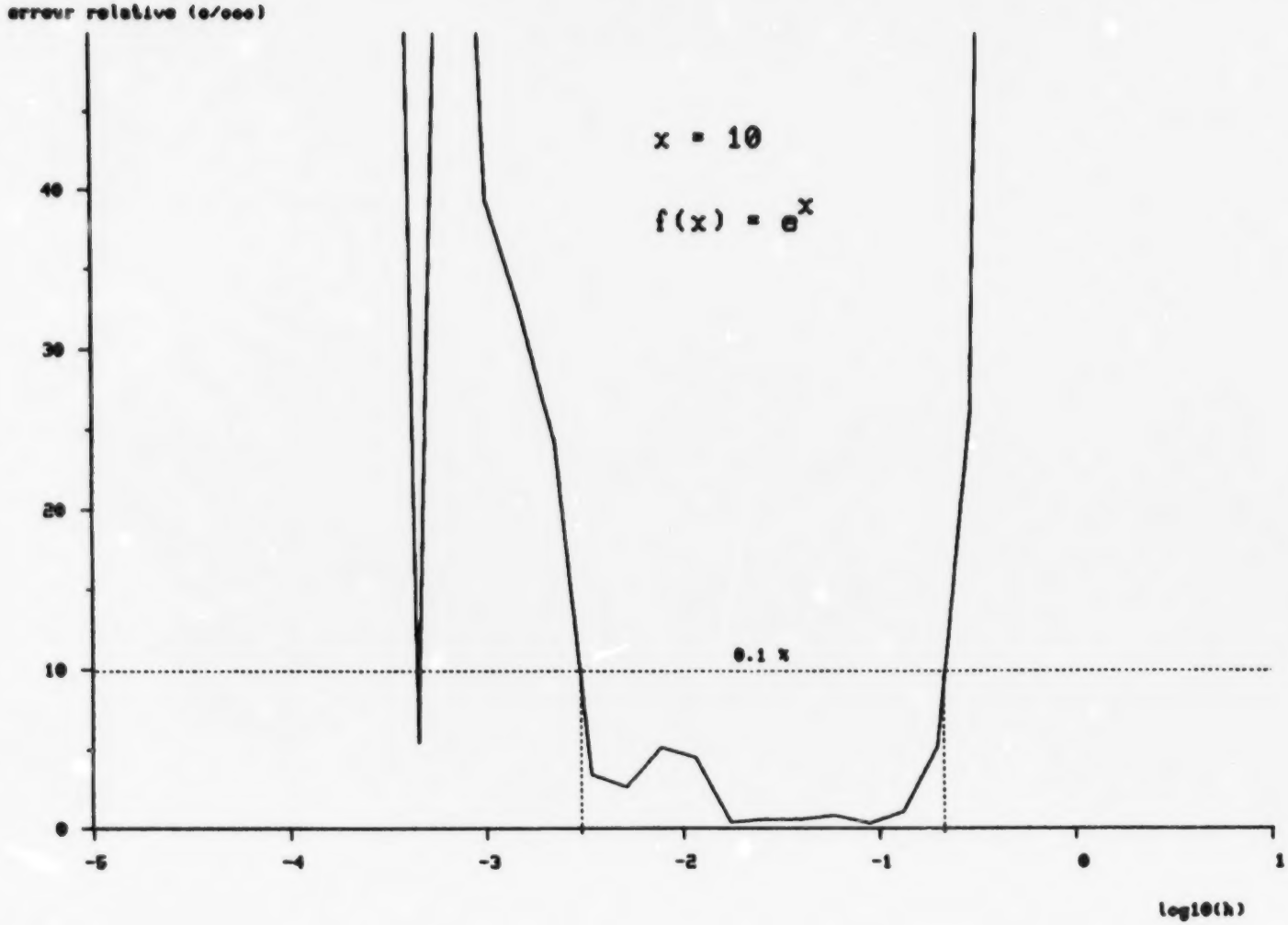

Figure 9 : EXP, x=10

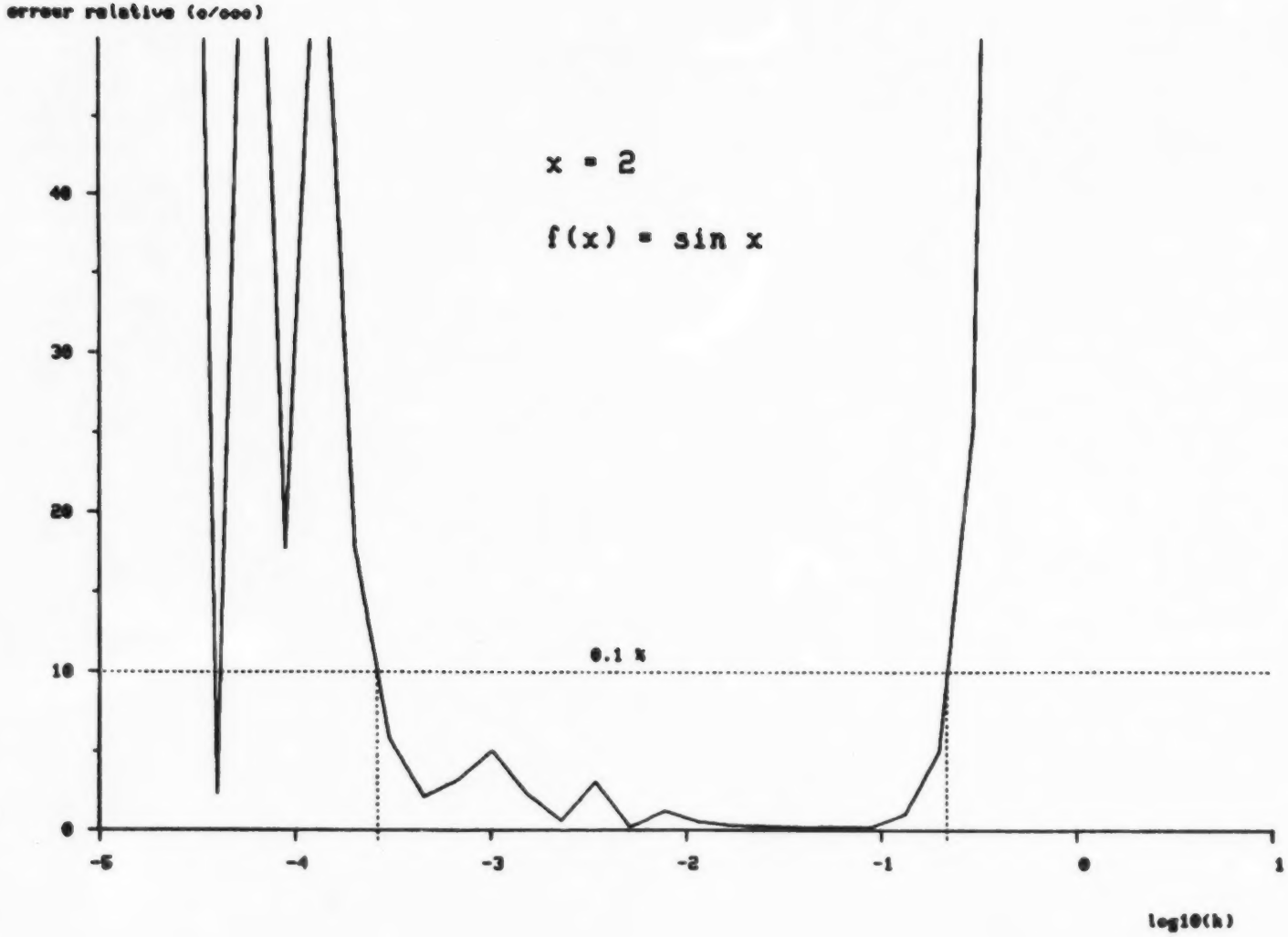

Figure 10 : SIN, x=2

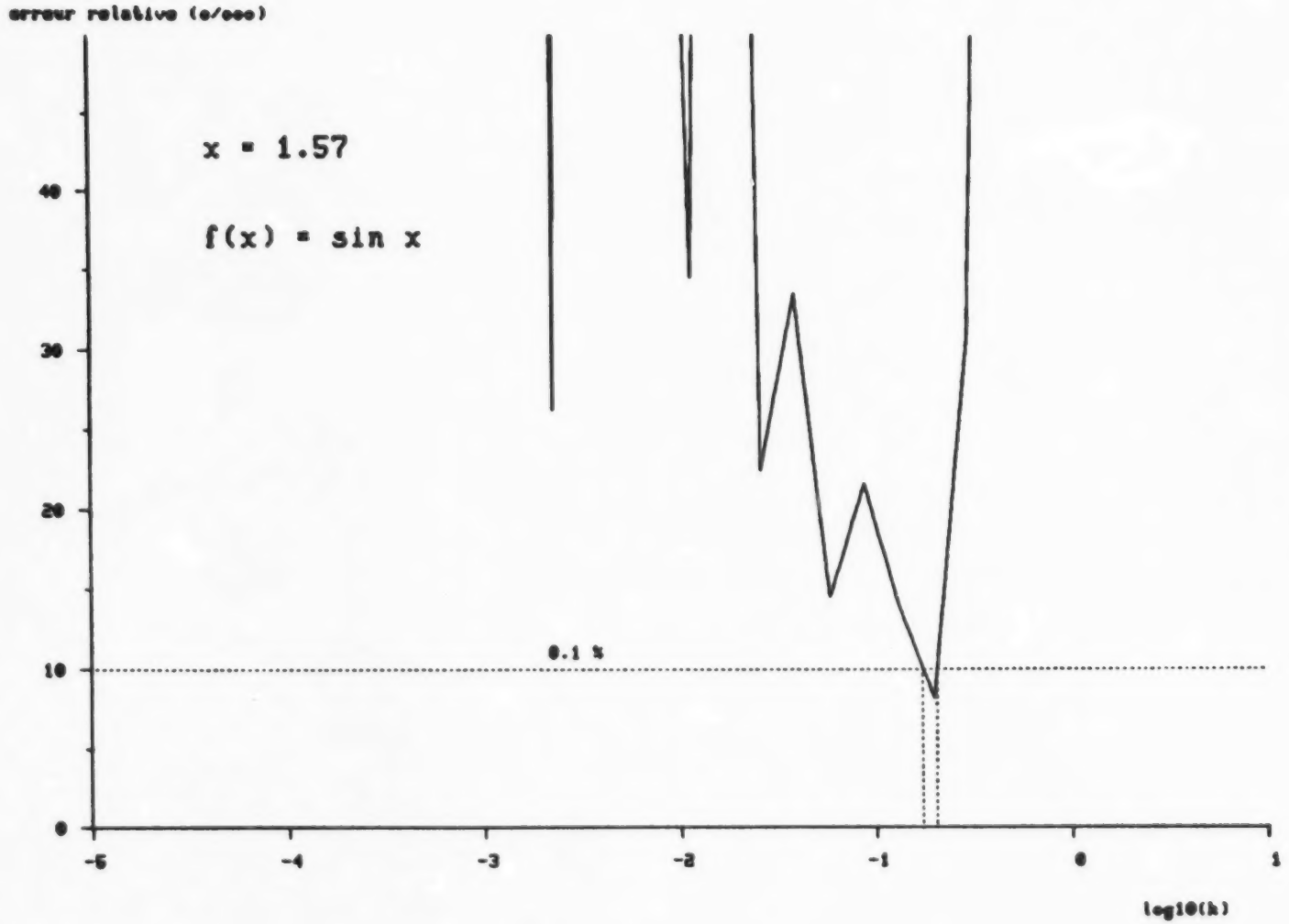

Figure 11 : SIN, x=1.57

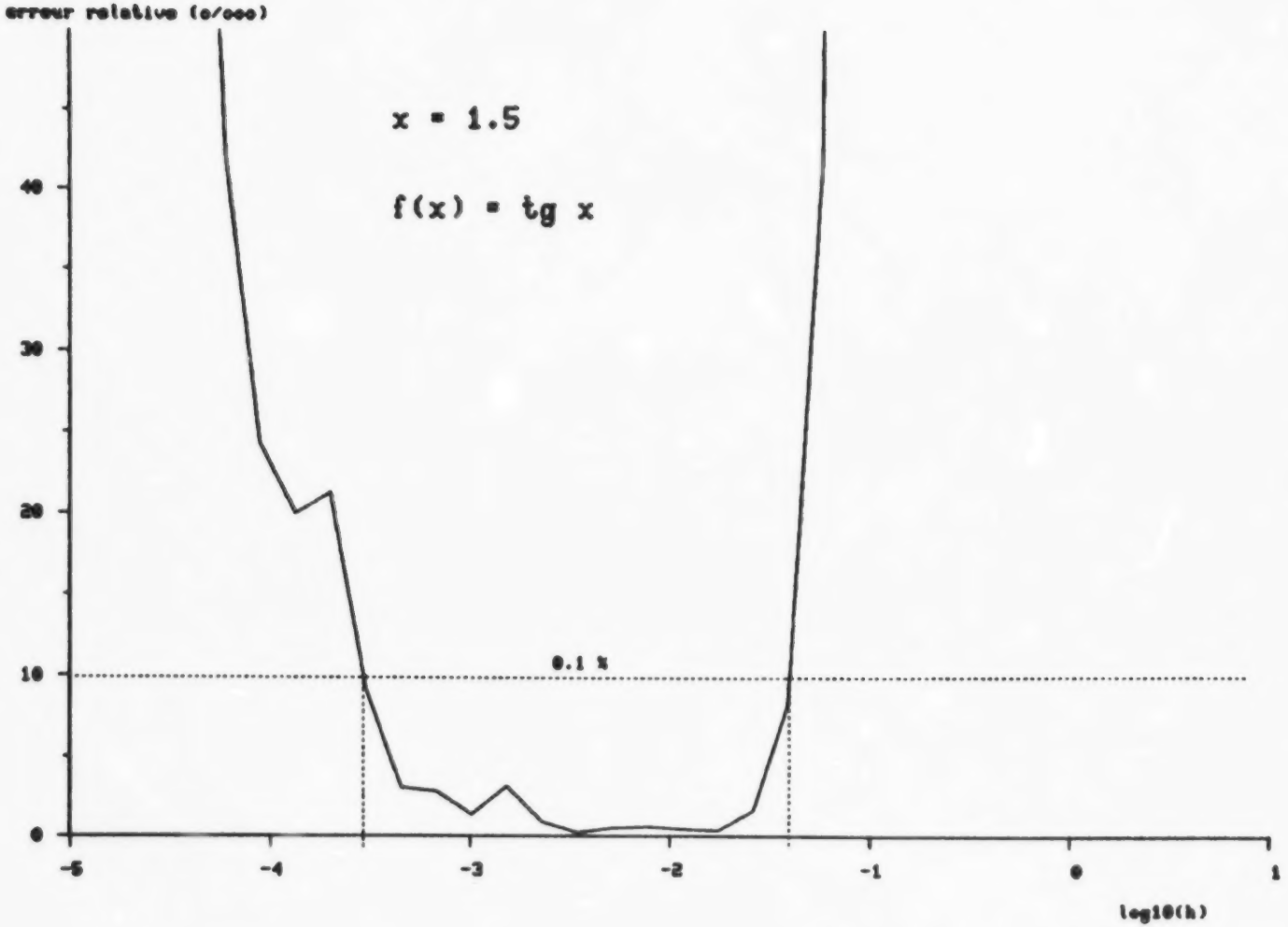

Figure 12 : TG, x=1.5

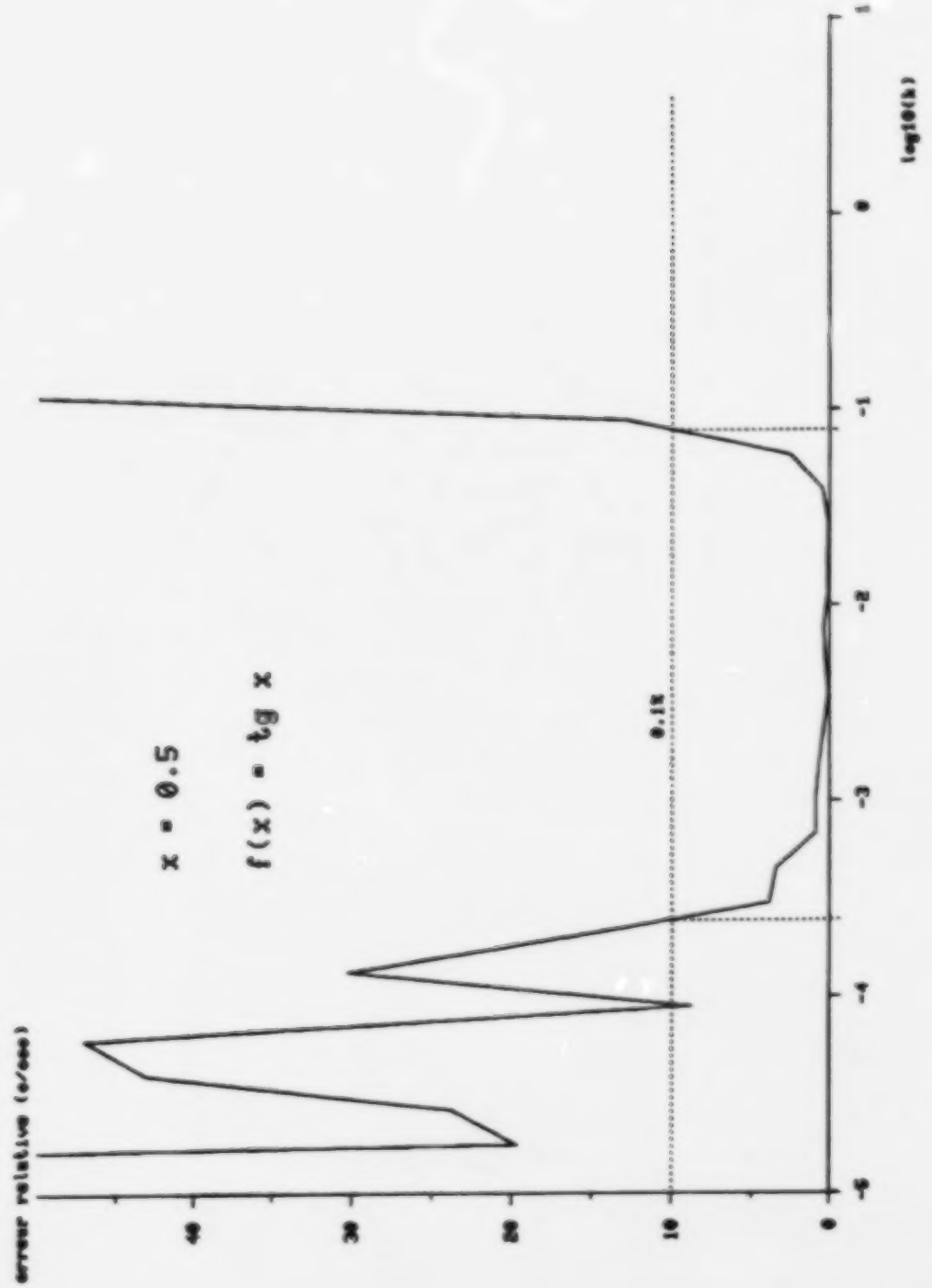

Figure 13 : TG, x=0.5

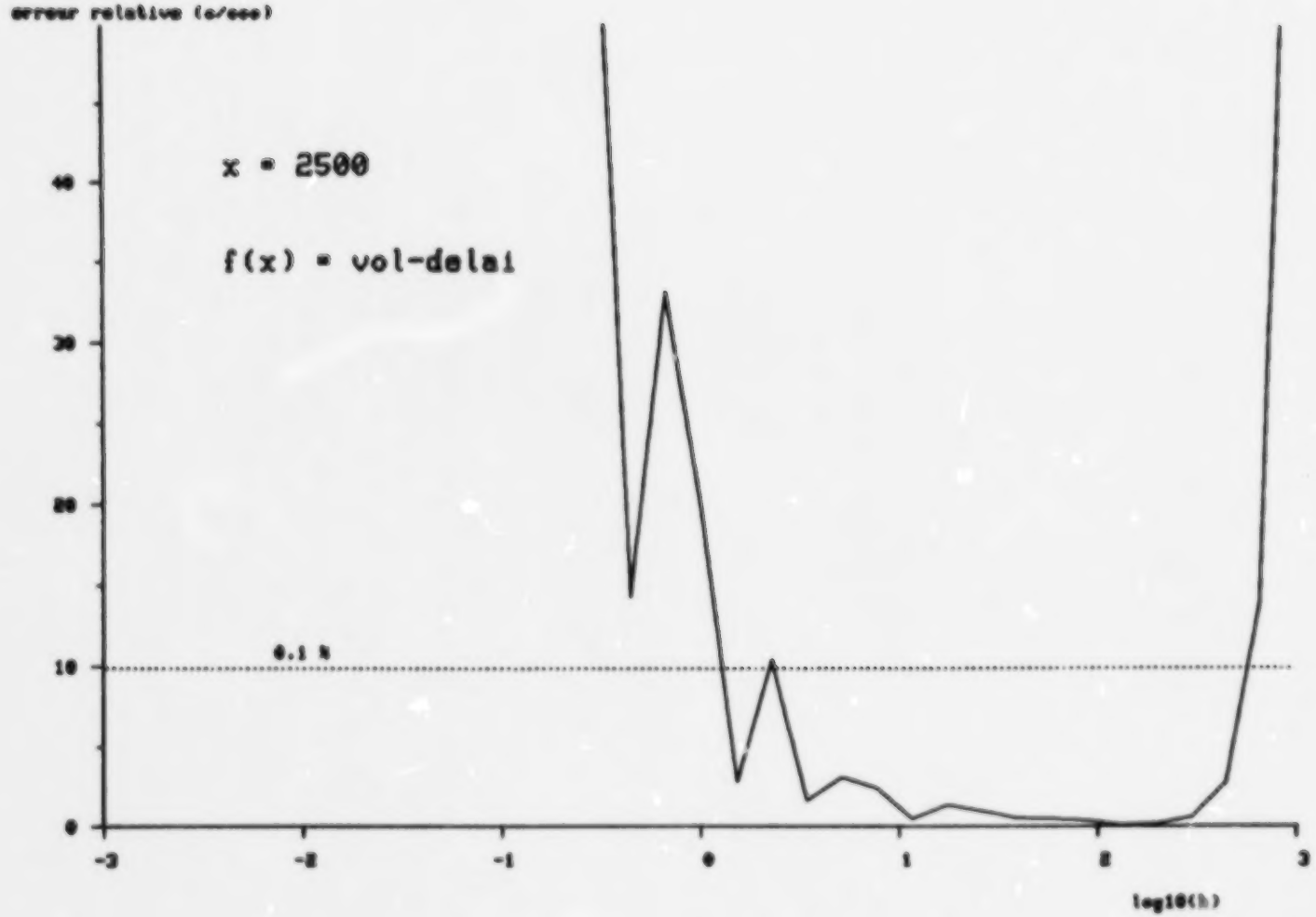

Figure 14 : VD, x=2500

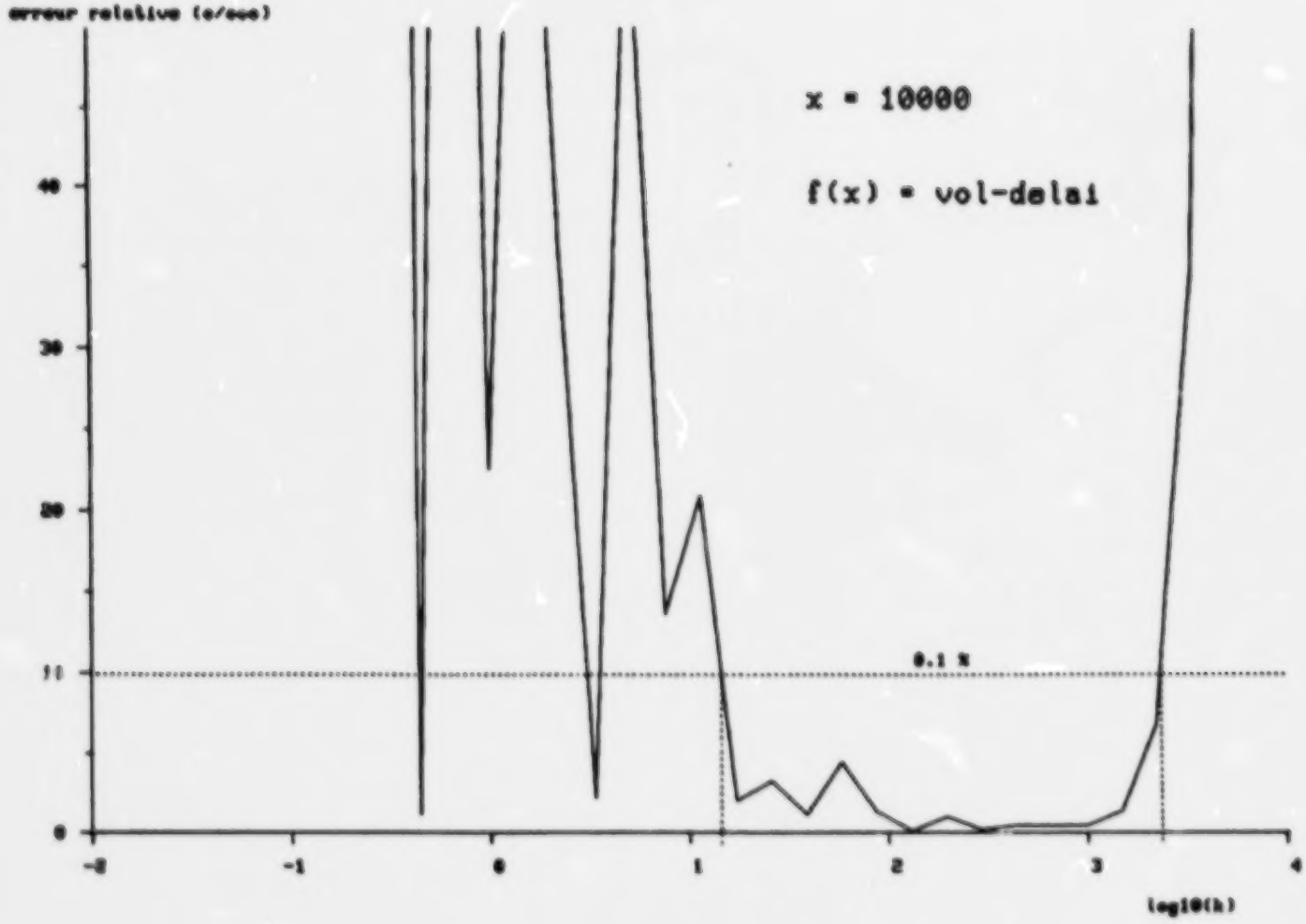

Figure 15 : VD, x=10000

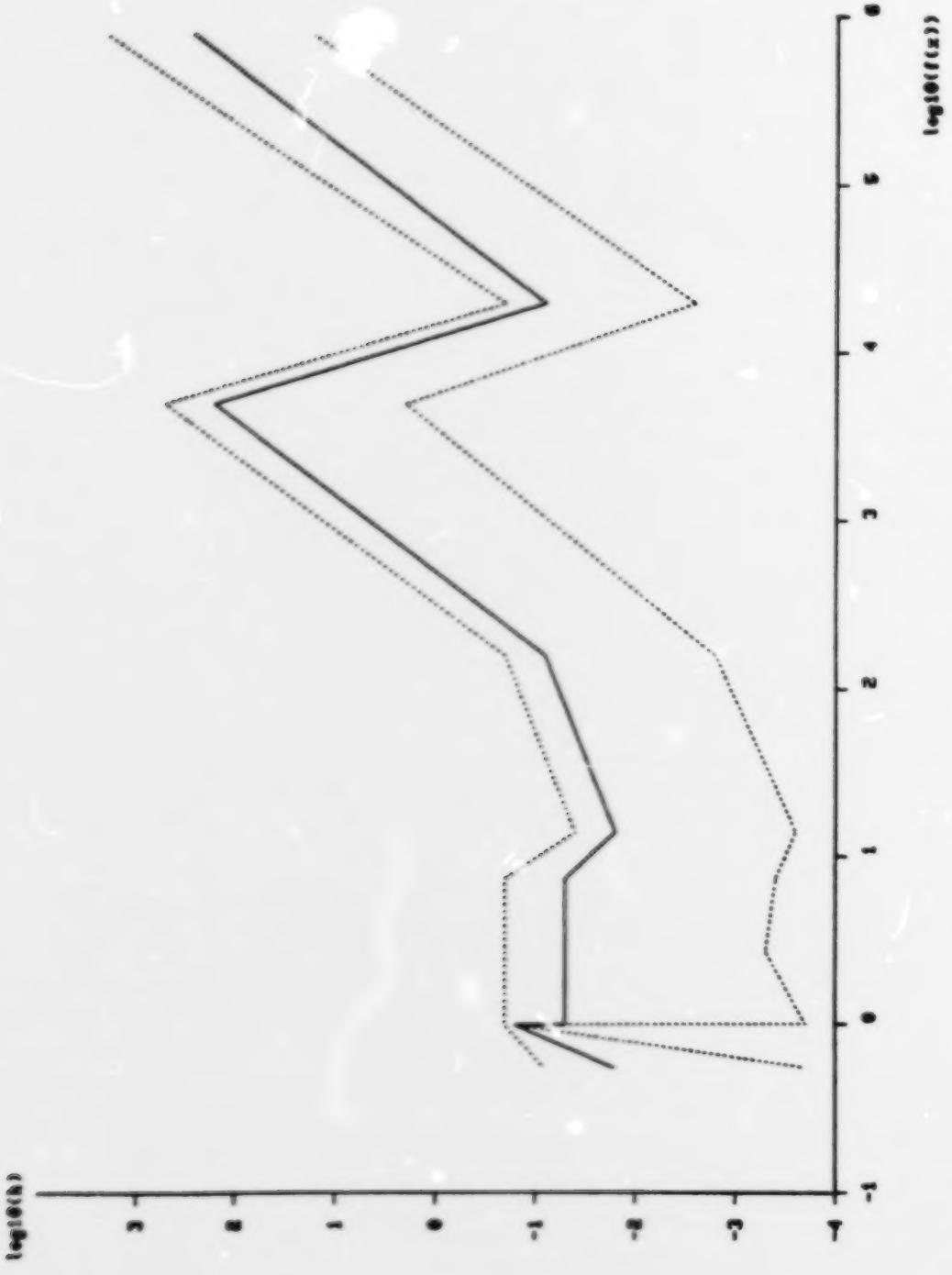

Figure 16 : Pas h optimal vs y_0

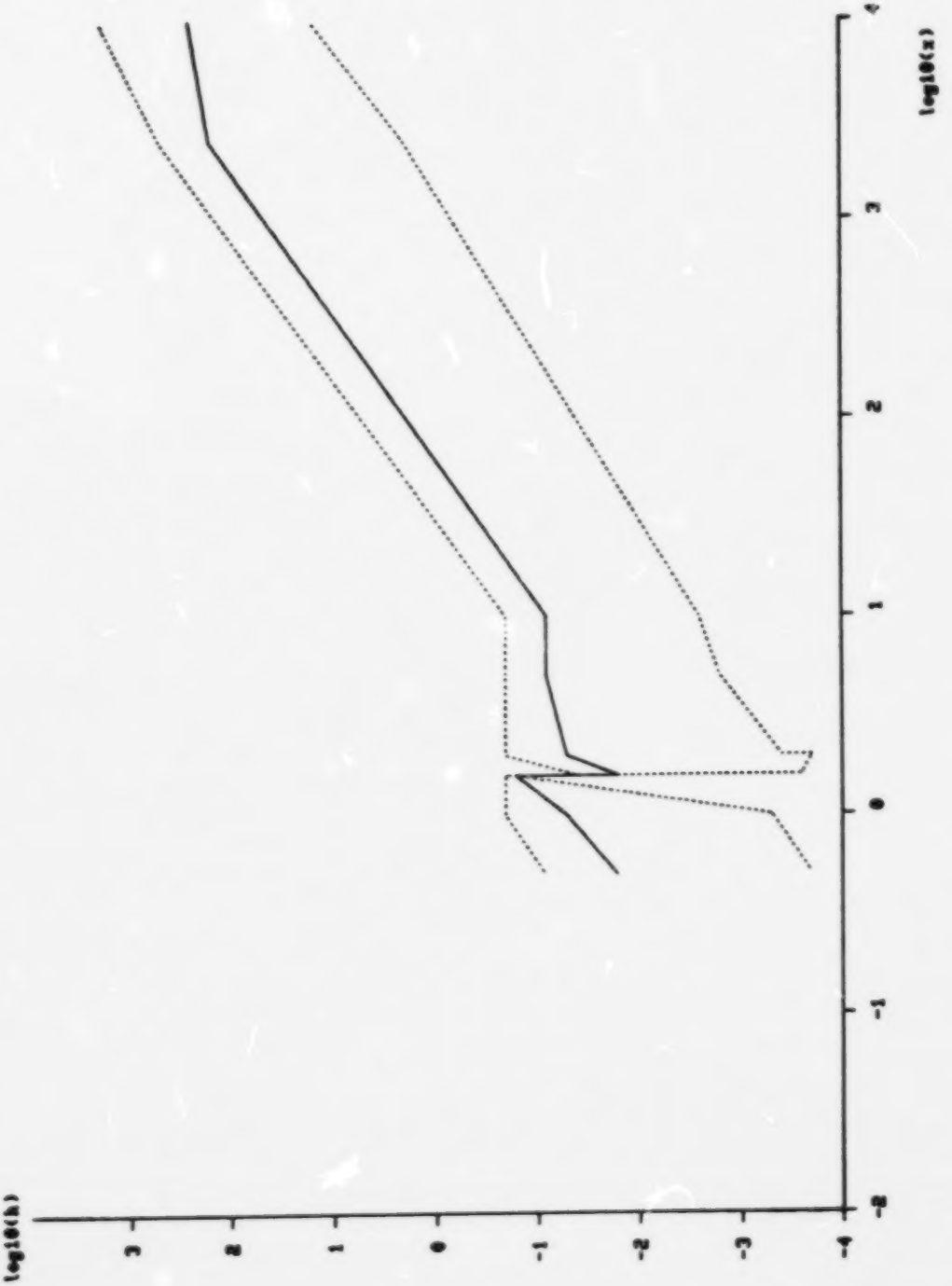

Figure 17 : Pas h optimal vs x_0

Comme on pouvait s'y attendre (la dérivée n'est nullement influencée par l'ajout d'une constante à la fonction), aucune forme particulière ne ressort du graphe de h versus y_0. Par contre, on peut (grossièrement) déceler une relation entre h et x_0. Cette relation est évidemment fortement influencée par le choix des fonctions test et des différentes valeurs de x. En effet, pour SIN et TG, il est clair qu'aucune relation non cyclique ne peut être trouvée entre h et x_0. La relation linéaire qui se dégage de la figure 17 est donc influencée par les fonctions monotones EXP et VD. Comme c'est le type de fonction qui va nous intéresser dans STAN, nous accepterons sans plus de justifications la formule suivante pour le calcul du pas h_0 (finalement, il faut bien partir de quelque chose!). Sur la figure 18, on a tracé à l'oeil une "bande de confiance linéaire" dont la droite milieu va nous fournir la relation cherchée. On obtient ainsi :

$$\log_{10}(h_0) = 0.95 \log_{10}(x_0) - 2$$

ou :
$$h_0 = 10^{(0.95 \log_{10}(x_0) - 2)} . \qquad (3)$$

Ayant choisi le pas h_0 initial, on peut alors calculer $f(x_0-h_0)$ et $f(x_0+h_0)$ et faire une première approximation de la dérivée en x_0, à savoir :

$$f'(x_0) \approx \frac{f(x_0+h_0) - f(x_0-h_0)}{2h} \triangleq z .$$

À l'aide de la valeur de z, on peut alors raffiner le pas initial choisi de la manière suivante :

si $z<1$ alors $h:=h_0$

sinon $h:=\frac{h_0}{z}$.

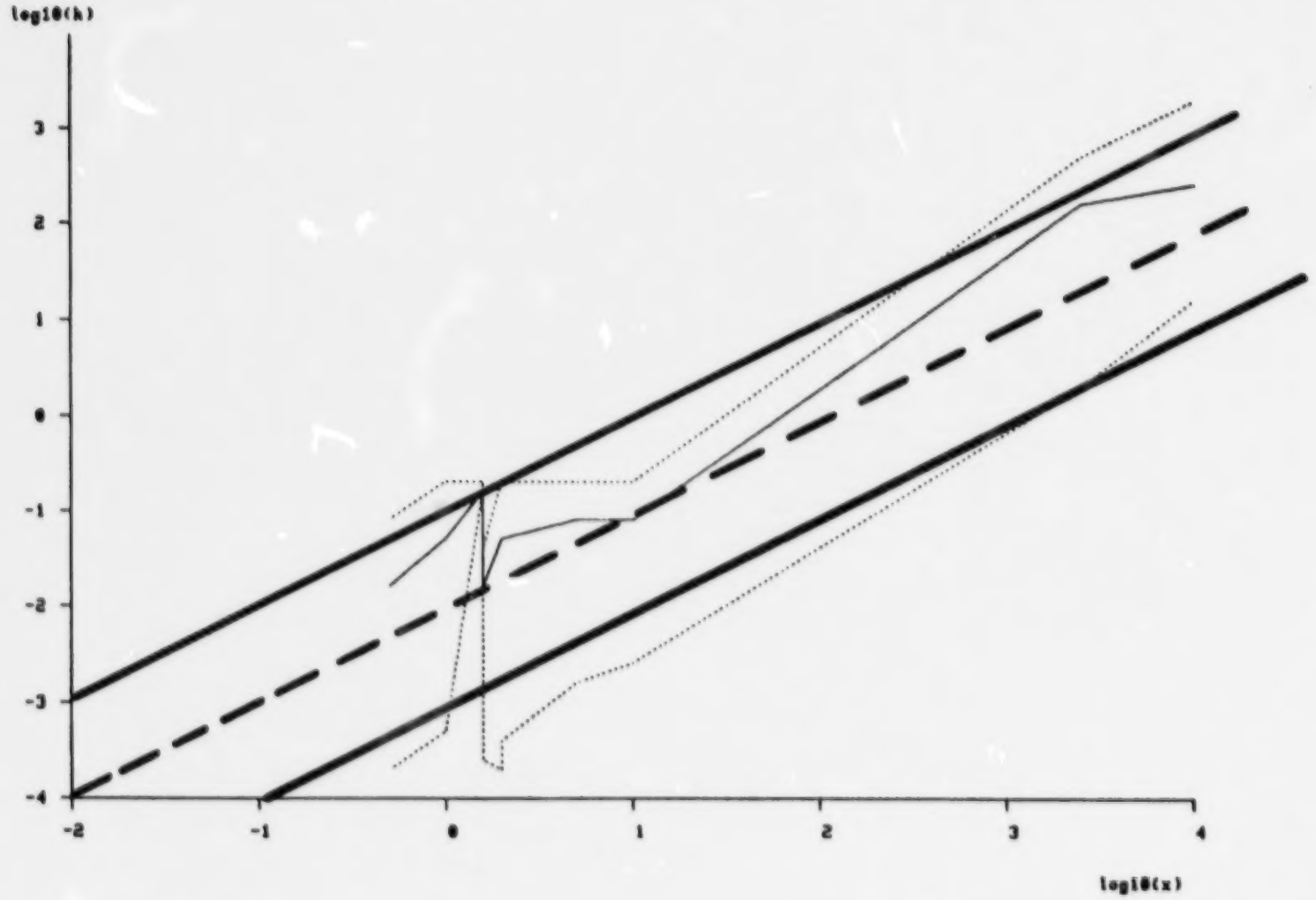

Figure 18 : Pas h_0 choisi

Dans le premier cas, les deux nouveaux points d'interpolation sont calculés en $(x_0 + 2h_0)$ et $(x_0 - 2h_0)$, dans le second cas en $(x_0 + \frac{h_0}{2})$ et $(x_0 - \frac{h_0}{2})$.

6. Quelques tests finals

Nous avons appliqué la procédure utilisant la formule (2) et le pas initial h_0 (3) au cas des quatre fonctions utilisées dans cette analyse en différents points x_0. Sur 74 tests, 2 ont donné une erreur relative supérieure à 0.1% alors que 71 d'entre eux ont exhibé une erreur inférieure à 0.01%. Les trois "mauvais" résultats se sont produits pour la fonction TG au voisinage de $\frac{\pi}{2}$...! Pour chacun de ces tests, nous avons comparé les approximations obtenues avec un polynôme d'ordre 5 (7 points d'interpolation). Ces dernières ne se sont révélées supérieures à celles d'ordre 3 que dans 24% des cas.

Concernant son efficacité, la procédure demande en moyenne $(4*t_0 + 0.0076)$ secondes CPU (Pixel-68000), où t_0 est le temps d'évaluation de la fonction f.

Nous avons remarqué que la majeure partie du temps propre de la procédure est utilisée pour calculer h_0 (logarithme + exponentiation). En simplifiant la formule de h_0 à :

$$h_0 = 10^{1.\log_{10}(x_0) - 2} = \frac{x_0}{100}$$

le temps propre de la procédure est passé de 0.0076 à 0.0025 secondes, ce qui est un gain appréciable si l'efficacité est cruciale. Dans ce cas, les proportions de 2/74 erreurs supérieures à 0.1% et de 71/74 erreurs inférieures à 0.01% ont été conservées, alors que les approximations d'ordre 5 se sont ici révélées supérieures dans 42% des cas. Le peu de perte de précision comparé au gain d'efficacité nous a fait opter pour cette formule simplifiée du pas initial h_0.

7. Le code de la procédure

```
c---prim-----------------------------
c
c     18/10/85  jg
c
c     PRIM computes the first derivative of function "fct"
c     at point x. "fct" must be declared (intrinsic or external)
c     in the calling program
c     PRIM returns value -99999. if some error occurs during
c     evaluation
c
c     calling sequence:
c          prim(x,xmin,xmax,fct)
c
c     parameters:
c          x      (input) : point where derivative must be
c                           evaluated
c          xmin   (input) : lower bound of the interval of
c                           definition of "fct"
c          xmax   (input) : upper bound of the interval of
c                           definition of "fct"
c          fct    (input) : intrinsic or external function to
c                           derivate
c          prim (output) : estimated value of fct'(x)
c
c---prim-----------------------------
      function prim(x,xmin,xmax,fct)
               real x,xmin,xmax
c
      real infini,h,h1,y1,y2,y3,y4,der,denom
      data infini / -99999./
c
c     initialize prim
c
      prim = infini
c
c     check validity of x
c
      if (x.lt.xmin .or. x.gt.xmax) return
c
c     compute initial step
c
      if (x.eq.0.) then
        h = 0.01
      else
        h = abs(x)/100.
      endif
      h1 = .5*(x - xmin)
      if (h1.le.0) return
      if (h1.lt.h) h = h1
c
c     compute first estimation of the derivative
c
      y1 = fct(x - h)
      y2 = fct(x + h)
      der = .5*(y2 - y1)/h
      if (abs(der).gt.1.) then
        h = h/2.
        y3 = fct(x - h)
        y4 = fct(x + h)
      else
        y3 = y1
        y4 = y2
        y1 = fct(x - 2.*h)
        y2 = fct(x + 2.*h)
      endif
c
c     compute second estimation of th derivative
c
      denom = h*12.
      der = 8.*(y4 - y3) - y2 + y1
      prim = der/denom
      return
      end
```

8. Résultats avec des fonctions utilisées dans STAN

Dans la procédure d'affectation développée dans le progiciel STAN, les coûts de transport marginaux doivent être évalués. Ces coûts sont donnés par des formules du type :

$$c_{\bar{\ell}}^{\bar{p}} = s_{\bar{\ell}}^{\bar{p}} + \sum_{p} \sum_{\ell} \frac{\partial s_{\ell}^{p}}{\partial v_{\bar{\ell}}^{\bar{p}}} v_{\ell}^{p}$$

où $\bar{p}$ est un produit à transporter, $\bar{\ell}$ est un arc du réseau, v_{ℓ}^{p} est le volume du produit p sur le lien ℓ (les variables du problème) et s_{ℓ}^{p} la fonction de coût moyen donnée par l'usager (cf. [3] pour les détails).

Comme on peut le constater, l'évaluation de ces coûts marginaux nécessite le calcul d'un grand nombre de dérivées partielles, d'où la nécessité de posséder une procédure de calcul efficace. Le tableau 22 montre les résultats obtenus pour des fonctions de coût moyen à complexité croissante (cf. [3] pour la signification des variables). À titre d'indication, le calcul (exact) du coût marginal de la fonction F7 à nécessité un développement analytique de 18 pages manuscrites... Les résultats obtenus sont donc plus que satisfaisants!

Tableau 22 : Estimation de coûts marginaux

fonction de coût moyen	coût marginal exact/estimé	erreur relative %
F1 = length	59.00/ 59.00	0.00
F2 = length * (1+voltot)	659.00/659.00	0.00
F3 = length * (1+strain)	202.10/202.10	0.00
F4 = length * $(1+\text{vehprod})^{1.5}$	234.50/234.50	0.00
F5 = length * $(1+\text{vehtot})^{1.5}$	601.60/601.60	0.00
F6 = length * $(1+e^{\text{train}/5})$	249.50/250.00	0.06
F7 = length * $(1+\frac{\text{train}}{\text{strain}+1}+\frac{\text{vehprod}}{\text{vehtot}+1}+\frac{\text{volprod}}{\text{voltot}+1})$	70.73/ 71.41	0.96

9. Conclusions

Malgré sa grande simplicité, la formule (2) semble fournir une bonne approximation de la dérivée de f en x_0. L'emploi d'une formule d'ordre supérieure ne se justifie pas, surtout si le coût d'évaluation de la fonction f est élevé. Le choix du pas h_0 s'est révélé efficace dans la majeure partie des tests effectués et l'est certainement pour toute fonction monotone. La procédure est toutefois peu fiable au voisinage d'une singularité de la fonction.

Références

[1] BABIN, A., CRAINIC, T.G., FLORIAN, M., et GUÉLAT, J., "STAN: An Interactive-Graphic System for Strategic Transportation Analysis at the National and Regional Levels", publication #495, Centre de recherche sur les transports, Université de Montréal (1987).

[2] CASALETTO, J.J. et RICE, J.R., "Smoothing and Estimating Derivatives of Equispaced Data", Applicable Analysis, vol. 8, 143-152 (1978).

[3] GUÉLAT, J., "La procédure de résolution du problème d'affectation multimode-multiproduct dans le progiciel STAN", rapport technique, Centre de recherche sur les transports, Université de Montréal (1986).

[4] HILDEBRAND, F.B., Introduction to Numerical Analysis, McGraw-Hill Inc., second edition (1974).

[5] KELLISON, S.G., Fundamentals of Numerical Analysis, Richard D. Irwin Inc., Homewood, Illinois (1975).